

CƠ SỞ LÝ THUYẾT HÓA HỌC



PHẦN I: CẤU TẠO CHẤT

CHƯƠNG I - CẤU TẠO NGUYÊN TỬ

I. Mở đầu

1. Các hạt cơ bản tạo thành nguyên tử:

* Nguyên tử có:

- Kích thước khoảng 1 $\overset{0}{A}$ (10^{-10} m).
- Khối lượng: 10^{-23} kg.

* Nguyên tử gồm:

- Hạt nhân (điện tích +Z) gồm:
  + Proton (p), m_p =1,672. 10^{-27}kg, tích điện dương + 1,602. 10^{-19}C.
  + Notron(n), m_n = 1,675. 10^{-27} kg, không mang điện .
  Hạt nhân của các nguyên tố đều bền (trừ các nguyên tố phóng xạ).
- Electron(e) ,me = 9,1. 10^{-31} kg , tích điện âm - 1,602. 10^{-19}C.

Trong bảng hệ thống tuần hoàn (HTTH), số TT nguyên tố = điện tích hạt nhân = số e.
VD: Ca có số TT= 20 => Z=số e=20.

2. Thuyết lượng tử

Ánh sáng là một sóng điện từ lan truyền trong chân không với vận tốc c = 3.10^8m/s, được đặc trưng bằng bước sóng λ hay tần số dao động: $\nu = \frac{c}{\lambda}$.

Thuyết sóng của ánh sáng giải thích được những hiện tượng liên quan với sự truyền sóng như giao thoa và nhiễu xạ nhưng không giải thích được những dữ kiện thực nghiệm về sự hấp thụ và sự phát ra ánh sáng khi đi qua môi trường vật chất.

Năm 1900, M.Planck đưa ra giả thuyết: " Năng lượng của ánh sáng không có tính chất liên tục mà bao gồm từng lượng riêng biệt nhỏ nhất gọi là lượng tử. Một lượng tử của ánh sáng (gọi là phôtôn) có năng lượng là:

$$E=h\nu$$

Trong đó: E là năng lượng của photon
ν : tần số bức xạ
h = 6,626 .10^{-34} J.s - hằng số Planck.

Năm 1905, Anhstanh đã dựa vào thuyết lượng tử đã giải thích thỏa đáng hiện tượng quang điện. Bản chất của hiện tượng quang điện là các kim loại kiềm trong chân không khi bị, khi bị chiếu sáng sẽ phát ra các electron; năng lượng của các electron đó không phụ thuộc vào cường độ của ánh sáng chiếu vào mà phụ thuộc vào tần số ánh sáng. Anhstanh cho rằng khi được chiếu tới bề mặt kim loại, mỗi photon với năng lượng hν sẽ truyền năng lượng cho kim loại. Một phần năng lượng E_0 được dùng để làm bật electron ra khỏi nguyên tử kim loại và phần còn lại sẽ trở thành động năng $\frac{1}{2}mv^2$ của electron:

$$h\nu = E_0 + \frac{1}{2}mv^2$$

Những bức xạ có tần số bé hơn tần số giới hạn $\nu_0 = \frac{E_0}{h}$ sẽ không gây ra hiện tượng quang điện.

Sử dụng công thức trên ta có thể tính được vận tốc của electron bật ra trong hiện tượng quang điện.

3. Các mô hình nguyên tử:

* ***Mô hình nguyên tử Rutherford:*** Mỗi nguyên tử có một hạt nhân mang điện tích dương và các e quay xung quanh.

* ***Mô hình nguyên tử Bohr:***

- Trong nguyên tử mỗi electron quay xung quanh nhân chỉ theo những quỹ đạo tròn đồng tâm có bán kính xác định.
- Mỗi quỹ đạo ứng với một mức năng lượng xác định của electron. Quỹ đạo gần nhân nhất ứng với mức năng lượng thấp nhất, quỹ đạo càng xa nhân ứng với mức năng lượng càng cao. Năng lượng của electron trong nguyên tử H_2 được xác định như sau:

$$E_n = -\frac{1}{8\varepsilon_0^2}.\frac{me^4}{h^2}.\frac{1}{n^2}$$

Trong đó $h = 6,626 .10^{-34}$ J.s - hằng số Planck

m - khối lượng của e

ε_o - hằng số điện môi trong chân không $\varepsilon_o = 8,854.10^{-12}$ C^2/Jm

n - là các số nguyên dương nhận các giá trị 1,2,3...,∝,

- Khi e chuyển từ quỹ đạo này sang quỹ đạo khác thì xảy ra sự hấp thụ hoặc giải phóng năng lượng. Khi e chuyển từ quỹ đạo có mức năng lượng thấp sang mức năng lượng cao hơn thì nó hấp thụ năng lượng. Khi electron chuyển từ một mức năng lượng cao sang mức năng lượng thấp hơn thì xảy ra sự phát xạ năng lượng. Năng lượng của bức xạ hấp thụ hoặc giải phóng là:

$$\Delta E = E_{n'} - E_n = h\nu = h.\frac{c}{\lambda}$$

* ***Kết quả và hạn chế của thuyết Bohr***

➢ Kết quả :

- Giải thích được quang phổ vạch của nguyên tử hyđro
- Tính được bán kính của nguyên tử hydro ở trạng thái cơ bản a= 0,529 A^0

➢ Hạn chế

- Không giải thích được các vạch quang phổ của các nguyên tử phức tạp

- Không giải thích được sự tách các vạch quang phổ dưới tác dụng của điện trường, từ trường
- Giả thuyết có tính độc đoán.

* Các mô hình trên đều không giải thích được 1 số vấn đề thực nghiệm đặt ra. Nguyên nhân là do:

- Không đề cập đến tính chất sóng của electron
- Do đó coi quỹ đạo chuyển động của electron trong nguyên tử là quỹ đạo tròn có bán kính xác định.

II. Quan điểm hiện đại về cấu tạo nguyên tử:

1. Lưỡng tính sóng hạt của các hạt vi mô

Năm 1924 nhà vật lý học người Pháp Louis De Broglie đã đưa ra giả thuyết: mọi hạt vật chất chuyển động đều có thể coi là quá trình sóng được đặc trưng bằng bước sóng λ và tuân theo hệ thức :

$$\lambda = \frac{h}{mv}$$

Trong đó: m - Khối lượng của hạt, kg

v - Vận tốc chuyển động của hạt , m/s

h - Hằng số Planck, h= $6{,}63.10^{-34}$J.s

- Đối với hạt vĩ mô: m khá lớn (h =const) → λ khá nhỏ -> tính chất sóng có thể bỏ qua.
- Đối với hạt vi mô : m nhỏ (h =const) → λ khá khá lớn -> không thể bỏ qua tính chất sóng.

Ví dụ 1: Một hạt có khối lượng m = 0,3 kg, vận tốc chuyển động V= 30m/s thì λ của hạt là?

Giải:

áp dụng hệ thức Louis De Broglie

$$\lambda = \frac{h}{mv} = \frac{6{,}63.10^{-34}}{0{,}3.30} = 0{,}736.10^{-34}\,m$$

λ của hạt vô cùng nhỏ nên bỏ qua tính chất sóng của hạt.

2. Nguyên lý bất định Heisenberg

* Phát biểu nguyên lý

Không thể xác định đồng thời chính xác cả toạ độ và vận tốc của hạt, do đó không thể vẽ được chính xác quỹ đạo chuyễn động của hạt.

$$\Delta x.\ \Delta v_x \geq \frac{h}{m}$$

Đây là hệ thức bất định Heisenberg

Trong đó Δx- Độ bất định (sai số) về toạ độ theo phương x

Δvx- Độ bất định (sai số) về vận tốc theo phương x

Nếu Δx càng nhỏ thì Δvx càng lớn, nghĩa độ bất định về toạ độ càng nhỏ thì độ bất định về vận tốc càng lớn.

Từ đây rút ra một kết luận quan trọng là không thể dùng cơ học cổ điển để mô tả một cách chính xác quỹ đạo chuyển động của hạt vi mô như thuyết của Bohr mà phải sử dụng một môn khoa học mới là: cơ học lượng tử.

III. Khái niệm về cơ học lượng tử

1.Hàm sóng:

Trạng thái chuyển động của e trong nguyên tử được mô tả bằng một hàm của toạ độ x,y,z và thời gian t, được gọi là hàm sóng $\psi(x,y,z,t)$.

Trong trường hợp t không đổi thì ψ không phụ thuộc vào thời gian, được gọi là trạng thái dừng của electron. Khi đó ψ chỉ phụ thuộc vào 3 biến x,y,z.

* Tính chất của hàm sóng:

- Có thể là âm, dương hay là 1 hàm phức.
- $|\psi|^2$ mật độ xác suất tìm thấy electron tại 1 điểm trong phần không gian xung quanh hạt nhân.
- $|\psi|^2 dv$ mô tả xác suất tìm thấy electron ở thời điểm t trong yếu tố thể tích dv bao quanh điểm có toạ độ x,y,z

Vì electron có mặt trong không gian vô hạn nên xác suất tìm thấy nó bằng 1:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dv = 1$$ → Là điều kiện chuẩn hóa hàm sóng.

2. Phương trình Schrodinger:

Để tìm ra hàm sóng ta phải giải phương trình sóng, còn gọi là phương trình Schrodinger. Đó là phương trình vi phân của hàm sóng ψ đối với hạt vi mô (eleclectron) chuyển động trong trường thế V:

$$\left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\Delta + V\right)\psi = E\psi$$

Trong đó: $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ - Toán tử Laplace

V- Là thế năng của hạt

E - Năng lượng toàn phần của hạt

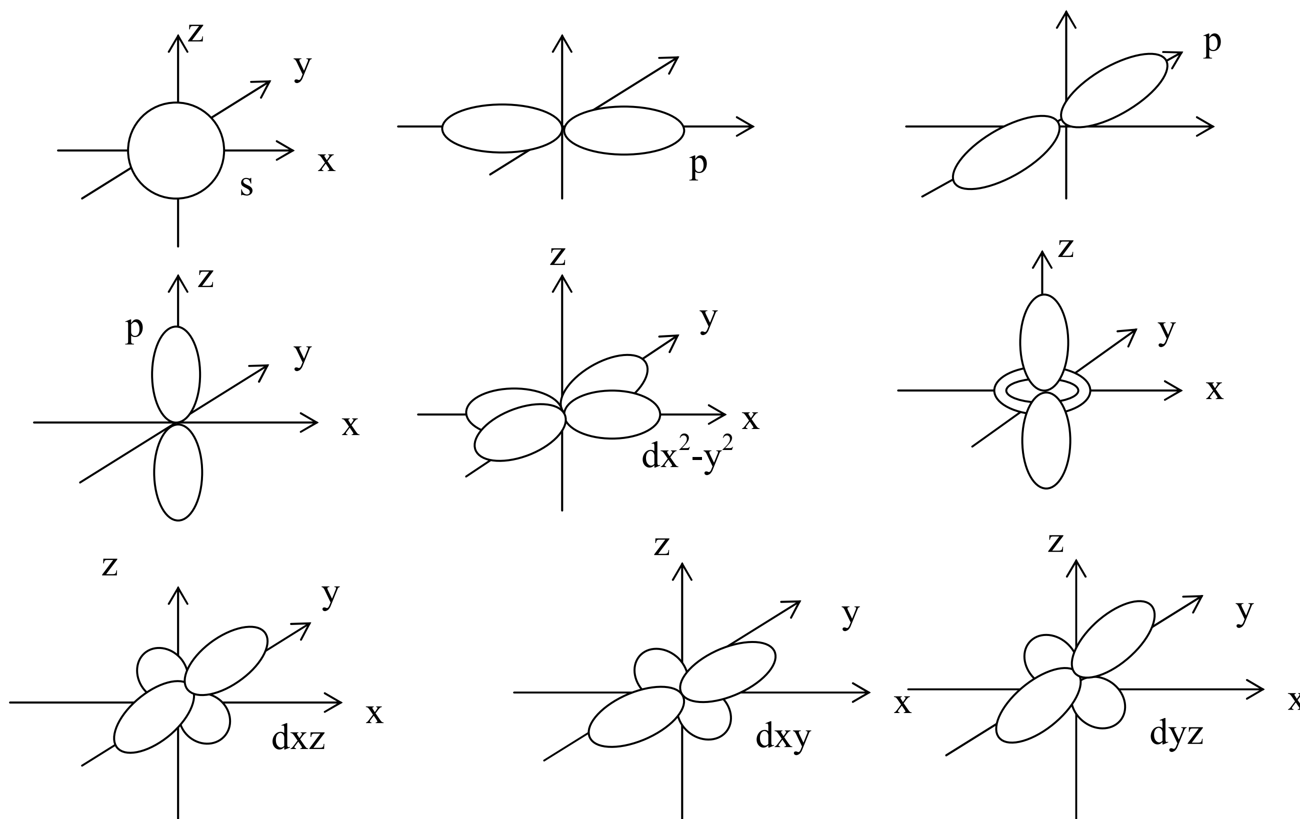
Có thể viết dưới dạng tổng quát hơn: $H\Psi = E\Psi$, trong đó H là toán tử Hamilton của hệ nghiên cứu.

Giải phương trình sóng → tìm được E, ψ → từ đó biết được chuyển động của e.

3. Obitan nguyên tử và mây electron.

- Mỗi giá trị nghiệm ψ gọi là 1 obitan nguyên tử, kí hiệu là AO.

  Mây e được quy ước là miền không gian gần hạt nhân nguyên tử, trong đó xác suất có mặt electron khoảng 90%. Mỗi đám mây electron được xác định bằng một bề mặt giới hạn gồm những điểm có cùng mật độ xác suất. Đám mây s là hình cầu. Đám mây p có dạng hình quả tạ đôi, đám mây d có dạng hình hoa bốn cánh.



IV. Hệ 1 e (nguyên tử H và ion tương tự).

1. Phương trình sóng:

- Hệ gồm 1 e và 1 hạt nhân điện tích +Ze:

Thế năng của hệ:

$$V = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon^0 r}$$

Trong đó r: khoảng cách giữa hạt nhân và e.

ε^0 : hằng số điện môi của chân không.

⇨ thế năng V chỉ thuộc vào r => trường tạo ra là trường xuyên tâm (trường có đối xứng tâm) gọi là trường Culông.

⇨ Phương trình *Schrodinger có dạng:*

$$\left(-\frac{h^2}{8\pi^2 m}\Delta - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r}\right)\psi = E\psi$$

- Để giải phương trình sóng trên → đưa về hệ tọa độ cầu: $\psi(x,y,z)$ → $\psi(r,\theta,\varphi)$

- Lời giải phương trình sóng *Schrodinger* sẽ thu được là năng lượng toàn phần của e (E), hàm sóng mô tả trạng thái chuyển động của e (ψ) và khi giải sẽ xuất hiện 3 số lượng tử n, *l* ,m.

2. Năng lượng:

* Kết quả giải phương trình sóng thu được năng lượng toàn phần của e:

$$E_n = -13{,}6.\frac{z^2}{n^2} \text{ (eV)}$$

n: có giá trị nguyên dương, gọi là số lượng tử chính.

* Nhận xét:

- Ee phụ thuộc vào n

  + n càng lớn -> Ee càng lớn và ngược lại.

  + n gián đoạn → Ee gián đoạn -> năng lượng của e trong nguyên tử được phân thành từng mức, mỗi mức ứng với 1 giá trị của n.

  + Khi n=1 → E_1 min -> mức E_1 gọi là trạng thái cơ bản. Vậy trạng thái cơ bản là trạng thái có mức năng lượng thấp nhất.

3. Hàm sóng:

ψ(x,y,z) = ψ(r,θ,φ)

- Khi giải phương trình sóng, dẫn đến việc đặt hàm sóng ψ(r,θ,φ) thành tích của hai hàm:

  $\psi(r,\theta,\varphi) = R_{n,l}(r).Y_{m,l}(\theta,\varphi)$

Trong đó: R(r) - Là hàm xuyên tâm phụ thuộc vào hai tham số n, l

Y (θ,φ) - Là hàm góc phụ thuộc vào hai tham số là l, m.

l - là số lượng tử phụ : l = 0,1,2,...,n-1 -> ứng với 1 giá trị của n có n giá trị của l.

m - là số lượng tử từ : m = 0, ±1,±2,...,±l -> ứng với 1 giá trị của l có 2l + 1 giá trị của m.

- Như vậy hàm sóng ψ thu được phụ thuộc vào 3 số lượng tử là n,l,m : $\psi_{n,l,m}$ hay nói cách khác: Một hàm sóng (1AO) được đặc trưng bằng 3 số lượng tử n,l,m.

* Nhận xét:

- Các e có cùng 1 mức năng lượng có thể có n trạng thái khác nhau, mỗi trạng thái được đặc trưng bởi số lượng tử l.
- ứng với mỗi 1 trạng thái có thể có 2l+1 cách định hướng khác nhau trong không gian.

VD: n=1 (mức năng lượng K) -> l =0, m=0 => $\psi_{n,l,m} = \psi_{100}$

ψ_{100} =1AO => mức năng lượng K có 1 AO.

n=2 (mức L) → l =0,1; m=0, ± 1.

n =2, l =0 => ψ_{200}=1AO.

n =2, l =1 => m=0 => ψ_{210}=1AO.

m=1 => ψ_{211}=1AO.

m=-1 => ψ_{21-1}=1AO.

Mức L có 4 AO

Vậy: Một mức năng lượng n có n^2 hàm sóng ψ => có n^2 AO.

Một giá trị của l có (2l+1) hàm sóng -> có (2l+1) AO

4. Giới thiệu một số mây e

Hình dáng của các mây e gần giống hình dáng của các AO tương ứng nhưng chỉ khác: khi biểu diễn hàm sóng thì có dấu (+) hay (-) còn mây e thì không có dấu.

Giá trị của l:	0	1	2	3
Kí hiệu:	s	p	d	f

Vậy với $n \geq 1$ => có ψ_{ns} = AO ns => mây ns.

$n \geq 2$ => có ψ_{np} = AO np => mây np.

m=0 (z) -> Ψ_{np_z} = AO npz => mây npz

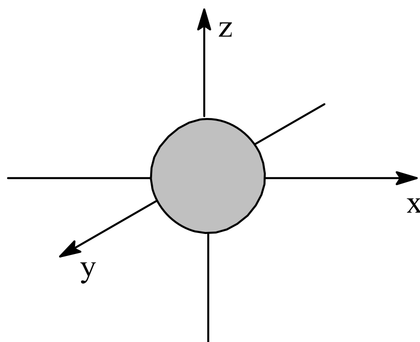
m=1 (x) -> Ψ_{np_x} = AO npx=> mây npx

m=-1 (y) -> Ψ_{np_y} = AO npy => mây npy.

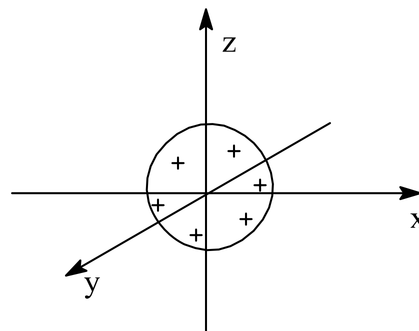
⇨ Mây np gồm 3 đám mây ứng với 3 giá trị của ψ.

a. Mây ns

- ψ_{ns} có tính chất đối xứng cầu, không phụ thuộc vào θ, φ.
- Mây s: Mật độ mây e phân bố đẳng hướng và là 1 khối cầu.



Mây s



AO Ψ_{ns}

b. Mây p

- Mỗi hàm ψ_{ns} là 2 mặt cầu đối xứng nhau qua gốc tọa độ có phần (+) và phần (-) theo chiều của trục tọa độ.
- Mỗi mây p: Có dạng hình quả tạ, cực đại của mây e phân bố dọc theo trục tọa độ.

5. Chuyển động riêng của e trong nguyên tử:

Chuyển động toàn bộ của e trong nguyên tử gồm 2 chuyển động:

- Chuyển động xung quanh nhân (chuyển động obitan) được đặc trưng bằng 3 số lượng tử n,l,m.
- Chuyển động riêng(chuyển động tự quay) được đặc trưng bằng số lượng tử từ spin ms; ms chỉ nhận 2 giá trị là +1/2 hoặc –1/2.

* Vậy chuyển động của toàn bộ e trong nguyên tử được đặc trưng bởi 4 số lượng tử n,l,m và ms trong đó:

- n đặc trưng cho kích thước mây e.
- l đặc trưng cho hình dáng mây e.
- m đặc trưng cho hướng mây e.

V. Hệ nhiều e

Hệ nhiều e -> e khảo sát chịu tác dụng của:

- Lực hút hạt nhân.
- Lực đẩy của các e còn lại.
  - ⇨ trường thế tạo ra không xuyên tâm, năng lượng của e trong trường này không những phụ thuộc vào n mà còn phụ thuộc vào l. Để khảo sát hệ này -> phải đưa hệ về hệ 1e -> dùng phương pháp gần đúng.

1. Phương pháp gần đúng 1e. Khái niệm điện tích hạt nhân hiệu dụng

* Phương pháp gần đúng 1e:

- Coi e khảo sát chuyển động trong 1 trường Z’ do hạt nhân và tất cả các e còn lại gây ra. Z’ được gọi là điện tích hạt nhân hiệu dụng.
- Z’ = Z- A, A là hằng số chắn của các e còn lại.
- Coi các e còn lại chắn bớt ảnh hưởng hạt nhân 1 đại lượng A
- Coi trường tạo ra do Z’ là trường xuyên tâm.

* Kết quả của bài toán 1 e có thể áp dụng cho bài toán nhiều e (bằng cách sử dụng phương pháp gần đúng trên): Các biểu thức tính E, ψ đều giống nhau, chỉ khác chỗ nào có Z thì được thay thế bằng Z’.

2. áp dụng kết quả bài toán 1e cho hệ nhiều e.

a. Năng lượng:

- Hệ 1 e : $E_n = -13,6.\frac{Z^2}{n^2}$ => E=f(n).

-Hệ nhiều e: $E_{n,l} = -13,6.\frac{Z'^2}{n^2}$ => E=f(n,Z’) =f(Z,n,l).

Nhận xét:

- Vậy trong hệ 1 e => E chỉ phụ thuộc vào số lượng tử chính n, còn trong hệ nhiều e thì E phụ thuộc vào n và Z’ (hoặc Z, n và l).
- Trong hệ nhiều e, một mức năng lượng bị tách thành n phân mức, mỗi phân mức đặc trưng bởi 1 giá trị của l.

l đặc trưng cho lực đẩy của các e còn lại, l càng lớn $E_{n,l}$ càng lớn.

- Trong hệ nhiều e, năng lượng có hiện tượng suy biến.

b.Hàm sóng

Hình dáng AO và mây e hoàn toàn không đổi (như trong hệ 1e) nhưng mật độ phân bố e theo khoảng cách tới nhân là khác nhau do $Z \neq Z'$.

3. ý nghĩa của 4 số lượng tử:

****Khái niệm lớp, phân lớp e:***

- Lớp e: Trong nguyên tử nhiều electron, những electron có cùng giá trị số lượng tử chính tạo thành một lớp. Các lớp được ký hiệu như sau:

n	1	2	3	4	5	6	7
Lớp	K	L	M	N	O	P	Q

n càng lớn thì lớp electron càng xa nhân và electron có năng lượng càng cao.

- Phân lớp e: Trong cùng một lớp các electron được chia thành n phân lớp, mỗi phân lớp trong cùng một lớp được đặc trưng bằng một giá trị của l. Để ký hiệu các phân lớp dùng các ký hiệu sau đây:

l	0	1	2	3
Ký hiệu	s	p	d	f

Để chỉ phân lớp electron thuộc lớp nào viết thêm hệ số có giá trị bằng số lượng tử chính n của lớp đó ở trước ký hiệu phân lớp.

Ví dụ:

Lớp K ứng với n = 1 chỉ gồm có một phân lớp được đặc trưng bởi l = 0 và n=1, 1s

Lớp L ứng với n=2 gồm có hai phân lớp được đặc trưng $\begin{cases} l = 0 \rightarrow 2s \\ l = 1 \rightarrow 2p \end{cases}$

Lớp M ứng với n=3 gồm có 3 phân lớp được đặc trưng $\begin{cases} l = 0 \rightarrow 3s \\ l = 1 \rightarrow 3p \\ l = 2 \rightarrow 3d \end{cases}$

- ý nghĩa của 4 số lượng tử:

a. Số lượng tử chính n.

- Xác định lớp e trong nguyên tử

VD: n =1 -> ứng với lớp K

n=2-> ứng với lớp L

- Xác định kích thước của mây e: n càng lớn -> kích thước mây e càng lớn và mật độ mây e càng loãng.

- Đối với nguyên tử H hay ion 1 e, n xác định mức năng lượng của e trong nguyên tử hoặc ion: $E_n = -13,6.\frac{Z^2}{n^2}$
- Đối với nguyên tử nhiều e -> Ee =f(n,l) → n chỉ xác định mức năng lượng trung bình của các e trong cùng 1 lớp: $E_{n,l} = -13,6.\frac{Z'^2}{n^2}$

b. Số lượng tử phụ l

- xác định hình dáng của đám mây e

Mây s hình cầu, mây p - quả tạ đôi, mây d dạng phức tạp.

c. Số lượng tử từ:

- m xác định sự định hướng của AO hay các mây electron trong không gian xung quanh hạt nhân.

Ví dụ: ứng với l=0 (mây s) => m=0; mây s chỉ có 1 sụ định hướng xung quanh hạt nhân (mây s có hình cầu).

l=1 (mây p) => ma= -1, 0 ,+1 mây p có 3 sự định hướng khác nhau xung quanh hạt nhân.

d. Số lượng tử từ spin ms: đặc trưng cho sự chuyển động riêng của e.

VI. Sự phân bố e trong nguyên tử nhiều e.

1. ***Nguyên lý ngoại trừ Pauli***

Trong một nguyên tử không thể tồn tại hai electron có cùng giá trị của 4 số lượng tử.

VD: Lớp K; n=1 => l=0 => m=0=> ms =+$\frac{1}{2}$ và ms =-$\frac{1}{2}$

⇨ lớp K có nhiều nhất 2 e: e thứ nhất có gía trị n =1, l=0, m =0 và ms =+$\frac{1}{2}$; e thứ 2 có giá trị n =1, l=0, m =0 và ms=-$\frac{1}{2}$

Hệ quả: Dựa vào nguyên lý pauli có thể tính được số electron tối đa trong một ô lượng tử, một phân lớp hay một lớp.

+ Số electron tối đa trong một ô lượng tử là 2e (vì trong một ô lượng tử các e có 3 số lượng tử giống nhau, số lượng tử thứ tư ms phải khác nhau, nhận giá trị là +1/2 và -1/2)

+ Số electron tối đa trong một phân lớp là 2(2l+1).

Phân lớp	s	p	d	f
Số ô lượng tử	1	3	5	7
Số e tối đa	2	6	10	14

VD: Tính số e tối đa ở phân lớp np (n có giá trị bất kì).

VD n =2, còn p ứng với l=1. Từ đó:

n=2 -> l=1 => m=-1 => ms=+1/2 và ms=-1/2 => ứng với AO 2py có nhiều nhất 2e.

n=2 -> l=1 => m=0 => ms=+1/2 và ms=-1/2 => ứng với AO 2pz có nhiều nhất 2e.

n=2 -> l=1=> m=+1 => ms=+1/2 và ms=-1/2 => ứng với AO 2px có nhiều nhất 2e.

Vậy phân lớp p có nhiều nhất 6e.

- Số e nhiều nhất ở các phân lớp: Một lớp e ứng với 1 giá trị của n có tối đa $2n^2$ e.

VD: Tính số e tối đa ở lớp L (n=2).

n=2 -> l=0 => m=0 => ms=+1/2 và ms=-1/2 có tối đa 2e.

l=1 => m =-1 => ms=+1/2 và ms=-1/2 có tối đa 2e.

m=0 => ms=+1/2 và ms=-1/2 có tối đa 2e.

m=+1 => ms=+1/2 và ms=-1/2 có tối đa 2e.

Vậy ở lớp L (n=2) có nhiều nhất là $8e=2n^2$.

2. *Nguyên lý vững bền:*

Trong nguyên tử các electron chiếm trước hết các AO có mức năng lượng thấp nhất .

Năng lượng của các AO trong nguyên tử được xếp theo thứ tự tăng dần như sau:

1s < 2s < 2p < 3s < 3p < 4s ≈ 3d < 4p < 5s ≈ 4d < 5p < 6s < 4f ≈ 5d < 6p < 7s

Thỏa mãn quy tắc Klechkowsky:

3. Quy tắc Hund

- ô lượng tử: Mỗi AO được đặc trưng bằng 3 số lượng tử n,l, m; mỗi AO được biểu diễn bằng 1 ô vuông được gọi là 1 ô lượng tử, kí hiệu là
- Quy tắc Hund: Trong một phân lớp chưa đủ số electron tối đa các electron có khuynh hướng phân bố đều vào các ô lượng tử sao cho số electron độc thân với spin song song là cực đại.

* Quy luật phân bố các e trong nguyên tử: phải tuân theo nguyên lý Pauli, nguyên lý vững bền và quy tắc Hund.

4. Cách viết cấu hình e của nguyên tử ở trạng thái cơ bản.

a. Cấu hình dạng chữ:

* Để viết cấu hình e dạng chữ cần biết:

- Số e trong nguyên tử (bằng Z).
- Thứ tự điền các electron theo nguyên lý vững bền .
- Biết số electron tối đa trong một phân lớp: Phân lớp s có tối đa 2e, phân lớp p - 6e, phân lớp d - 10e, phân lớp f- 14e.

* Cách viết:

- Viết dưới dạng kí hiệu các phân lớp.
- Điền e theo thứ tự năng lượng tăng dần và các e ở mỗi phân lớp viết dưới dạng số mũ (tổng tất cả các số mũ ở các phân lớp = $\sum$ số e = Z).

VD: Viết cấu hình e nguyên tử của Mn (Z=25) ở dạng chữ.

Mn (Z=25) -> số e = 25 : $1s^22s^22p^63s^23p^64s^23d^5$

Hay: $1s^22s^22p^63s^23p^63d^54s^2$

* Chú ý: - Khi viết cấu hình e của nguyên tử thì số e =Z nhưng khi viết cấu hình e của ion thì phải chú ý số e sẽ $\neq$ Z (điện tích hạt nhân của ion và nguyên tử như nhau nhưng số e thì phảikhác nhau): Số e < Z (đối với ion dương) và số e > Z (đối với ion âm).

VD: Mn^{3+} (Z=25) -> số e =22: $1s^22s^22p^63s^23p^63d^4$.

Viết cấu hình e của nguyên tử hay ion: khi điền e vào nguyên tử luôn điền theo thứ tự năng lượng theo nguyên lý vững bền nhưng khi mất e (để trở thành ion) thì mất e ở lớp ngoài cùng trước (mất từ lớp ngoài rồi tới lớp trong) : điền (n-1)d sau ns, khi mất ns trước (n-1)d.

6. Cấu hình e nguyên tử dạng ô lượng tử:

* Cách viết:

- Viết cấu hình e dạng chữ.
- Dựa vào cấu hình e dạng chữ viết cấu hình e dạng ô lượng tử (mỗi ô lượng tử chứa tối đa 2e).
- Mỗi e được kí hiệu bằng 1 mũi tên quay lên (với ms=+1/2) , quay xuống quay lên (với ms=-1/2).
- Nếu 1 ô có 2e -> 2e phải có spin ngược chiều nhau => 2e đã ghép đôi, $\sum spin$ =0. Nếu 1 ô có 1e -> gọi là e độc thân.
- Với những phân lớp chưa bão hòa e-> việc fân bố e phải tuân theo quy tắc Hund.

VD: Viết cấu hình e dưới dạng ô của N (z=7)

N(Z=7) $1s^22s^22p^3$



* Chú ý: Trong một số nguyên tử, viết cấu hình e theo nguyên lý vững bền ở trạng thái cơ bản có cấu hình $ns^2(n-1)d^4$ hoặc $ns^2(n-1)d^9$ thì có sự chuyển 1e ở ns sang (n-1)d thành

$ns^1(n-1)d^5$ hoặc $ns^1(n-1)d^{10}$. Nguyên nhân là do hiệu năng lượng ($E_{(n-1)d}$- Ens) nhỏ và các phân lớp d^{10} và d^5 là các phân lớp bão hòa và nửa bão hòa là các phân lớp bền => khi ở (n-1)d có số e gần bằng 10 (hoặc gần bằng 5) thì 1 e ở ns sẽ chuyển sang (n-1)d để tạo thành các phân lớp bền.

Chương II
ĐỊNH LUẬT TUẦN HOÀN - BẢNG TUẦN HOÀN CÁC NGUYÊN TỐ HOÁ HỌC

I. Mở đầu

Năm 1869, Mendeleep đã khám phá ra định luật tuần hòan : " Tính chất của các nguyên tố và hợp chất của chúng biến thiên tuần hoàn theo chiều tăng của khối lượng nguyên tử". Trên cơ sở đó Mendeleep đã xếp 63 nguyên tố thành bảng tuần hoàn (HTTH) theo chiều tăng của khối lượng nguyên tử.

Với cách sắp xếp đó cho phép suy đoán sự xuất hiện các nguyên tố mới nhưng còn một số hạn chế:

- Không giải thích được nguyên nhân của tính tuần hoàn.
- Không giải thích được sự khác nhau về số nguyên tố giữa các hàng.
- Có trường hợp ngoại lệ, khối lượng nguyên tử của nguyên tố đứng trước lớn hơn khối lượng nguyên tử của nguyên tố đứng sau.

Ar(Z=18): 39,948 > K (Z= 19) : 39,698

Co (Z=27): 58,933> Ni(Z=28): 58,70

Te (Z= 52): 127,60> I (Z=53): 126,9015

II. Định luật tuần hoàn. HTTH theo thuyết cấu tạo hiện đại.

Ngày nay, dưới ánh sáng của thuyết cấu tạo nguyên tử, định luật tuần hoàn và HTTH là hệ quả tự nhiên của các quy luật tuần hoàn trong cấu tạo vỏ e của các nguyên tử.

1. Định luật tuần hoàn:

"Tính chất của các nguyên tố và hợp chất của chúng biến thiên tuần hoàn theo chiều tăng của điện tích hạt nhân".

Tính tuần hoàn đólà do sự biến đổi tuần hoàn trong cấu tạo của các nguyên tử theo chiều tăng của điện tích hạt nhân. => Tính chất nguyên tố và hợp chất của chúng do điện tích hạt nhân quyết định.

2. Bảng tuần hoàn các nguyên tố hóa học

Để thể hiện được tính tuần hoàn trong cấu tạo nguyên tử và tính chất cảu các nguyên tố -> xếp các nguyên tố thành HTTH theo nguyên tắc sau:

* Nguyên tắc xếp:

- Xếp theo chiều tăng dần của điện tích hạt nhân.
- Đảm bảo tính tuần hoàn về cấu hình e nguyên tử của các nguyên tử.

+ Các nguyên tử có cùng số lớp e xếp theo 1 hàng (chu kỳ).

+ Các nguyên tử có số e lớp ngoài cùng giống nhau hoặc 2 phân lớp e ngoàicùng giống nhau được xếp vào 1 cột.(nhóm)

a. Chu kì: Là tập hợp các nguyên tố có cùng số lớpvỏ e và đặt theo 1 hàng ngang.

- Số lớp e = số thứ tự chu kỳ.

- Gồm 7 hàng ngang ứng với 7 chu kỳ, không phân biệt chu kỳ lớn nhỏ, chẵn lẻ:

  Chu kỳ 1: Chỉ có 2 nguyên tố (xây dựng ở phân lớp 1s)

  Chu kỳ 2, 3: Mỗi chu kỳ có 8 nguyên tố (xây dựng ở các phân lớp 2s, 2p, 3s, 3p)

  Chu kỳ 4, 5: Mỗi chu kỳ có 18 nguyên tố

  Chu kỳ 6: Có 32 nguyên tố

  Chu kỳ 7: Còn đang dở dang.

* Nhận xét: - Trong 1 chu kì đi từ đầu tới cuối chu kỳ, số e lớp ngoài cùng tăng dần từ 1->8.

- Sự biến thiên tuần hoàn trong cấu tạo nguyên tử của các nguyên tố không lặp lại 1 cách đơn giản mà có sự mở rộng từ chu kì 4 -> số nguyên tố trong các chu kỳ tăng.

b. Nhóm: Là tập hợp các nguyên tố có cấu hình e hóa trị tương tự nhau xếp thành một cột.

Gồm 8 nhóm: đánh số từ I->VIII, mỗi nhóm được chia thành 2phân nhóm:

* Nhóm A(phân nhóm chính): Nguyên tử của các nguyên tố nhóm A có đặc điểm:

- Nguyên tử đang được điền e vào phân lớp ns hoặc np (n là lớp ngoài cùng).
- VD: Z=3; $1s^2 2s^2$

  Z= 9 $1s^2 2s^2 2p^5$
- Số e lớp ngoài cùng của nguyên tử = số thứ tự nhóm chứa nó.
- Để nhận biết 1 nguyên tố thuộc nhóm A nào -> dựa vào cấu hình e nguyên tử:

  Nhóm IA: gồm các nguyên tố có cấu trúc e lớp ngoài cùng là ns^1

  Nhóm IIA: ns^2

  Nhóm IIIA: ns^2np^1

  Nhóm IVA: ns^2np^2

  Nhóm VA: ns^2np^3

  Nhóm VIA: ns^2np^4

  Nhóm VIIA: ns^2np^5

  Nhóm VIIIA: ns^2np^6

- Nhóm B(phân nhóm phụ): Nguyên tử của các nguyên tố nhóm B có đặc điểm:

- Nguyên tử đang được điền e vào phân lớp (n-1)d hoặc (n-2)f

VD Z=21 : $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^1$ => thuộc nhóm B

- Số e lớp ngoài cùng của hầu hết các nguyên tử nguyên tố nhóm B là 2 (ns^2), của một số ít là 1 (ns^1) và của 1 trường hợp Pd (Z=46) không chứa e nào ở lớp ngoài cùng ($5s^0$). Vậy số e ở lớp ngoài cùng của các nguyên tử nguyên tố nhóm B < 3=> hầu hết các nguyên tố nhóm B là kim loại.
- Để nhận biết 1 nguyên tố thuộc nhóm B nào -> dựa vào cấu hình e nguyên tử:

  Nhóm IIIB: có hai phân lớp ngoài cùng là $(n-1)d^1ns^2$

  Nhóm IVB: có hai phân lớp ngoài cùng là $(n-1)d^2ns^2$

Nhóm VB: có hai phân lớp ngoài cùng là $(n-1)d^3ns^2$

Nhóm VIB: có hai phân lớp ngoài cùng là $(n-1)d^4ns^2 \rightarrow (n-1)d^5ns^1$

Nhóm VIIB: có hai phân lớp ngoài cùng là $(n-1)d^5ns^2$

Nhóm VIIIB: có hai phân lớp ngoài cùng là $(n-1)d^{6,7,8}ns^2$

Nhóm IB: có hai phân lớp ngoài cùng là $(n-1)d^{10}ns^1$

Nhóm IIB: có hai phân lớp ngoài cùng là $(n-1)d^{10}ns^2$

* Nhận xét:

+ Nếu viết cấu hình e nguyên tử dựa vào dãy năng lượng theo nguyên lý vững bền => thì tất cả các nguyên tố nhóm B đều có 2 e ở lớp ngoài cùng ns^2. Tuy nhiên thực nghiệm xác định rằng ở 1 số nguyên tử nguyên tố nhóm B có 1 e ở ns -> (n-1)d, trừ 1 trường hợp Pd 2e ở $5s^2$ đều chuyển vào 4d. Các trường hợp này xảy ra khi phân lớp (n-1)d gần nửa bão hoà (d^5) hoặc bão hòa (d^{10}) là các phân lớp bền và năng lượng e phân lớp (n-1) và ns xấp xỉ nhau.

+ Cấu hình e nguyên tử của 1 số nguyên tố mà sự điền e cuối cùng xảy ra ở (n-2)f cũng hơi khác so với cách điền e theo nguyên lý vững bền.

VD Z=64: $1s^22s^22p^63s^23p^64s^23d^{10}4p^65s^24d^{10}5p^66s^24f^8$ (theo nguyên lý vững bền)

Trong thực tế: $1s^22s^22p^63s^23p^64s^23d^{10}4p^65s^24d^{10}5p^66s^24f^75d^1$.

1e ở 4f chuyển sang 5d: để đạt tới cấu hình bão hòa nửa số e f^7 bền.

* Nguyên tố s, p, d, f:

- Nguyên tố mà sự điền e cuối cùng vào nguyên tử xảy ra ở ns gọi là các nguyên tố s. Định nghĩa tương tự đối với các nguyên tố p, d,f.

+ Các nguyên tố nhóm IA, IIA là các nguyên tố s.

+ Các nguyên tố nhóm IIIA->VIIIA là các nguyên tố p.

+ Các nguyên tố nhóm B là các nguyên tố d (riêng nhóm IIIB có cả nguyên tố f).

+ Các nguyên tố f mà sự điền e cuối cùng vào nguyên tử xảy ra ở 4f -> gọi là các nguyên tố lantanoit hoặc các nguyên tố họ lantan, còn các nguyên tố f mà sự điền e cuối cùng ở 5f -> các nguyên tố Actinoit (họ actini).

3. Một số dạng bảng HTTH

a. Dạng bảng ngắn

- Chu kỳ nhỏ có 1 hàng, chu kỳ lớn có 2 hàng.
- Có 8 nhóm, mỗi nhóm chia thành 2 phân nhóm : phân nhóm chính (A) và phân nhóm phụ (B).

b. Dạng bảng dài:

- Các nguyên tố trong mỗi chu kỳ được xếp thành 1 hàng.
- Toàn bảng có 16 nhóm, đánh số từ IA, IIA...VIIIA và IB,IIB.. VIIIB. Họ lantan và họ actini gồm các nguyên tố f được xếp vào nhóm IIIB.

III. Sự biến đổi tuần hoàn 1 số tính chất của các nguyên tố

1.Hiệu ứng chắn:

Trong nguyên tử H có 1 e -> e này bị toàn bộ điện tích hạt nhân hút

Trong nguyên tử nhiều e, ngoài lực hút của hạt nhân đối với các e, còn lực đẩy giữa các e có điện tích cùng dấu. Lực đẩy này làm giảm lực hút của hạt nhân đối với các e. Trong trường hợp này người ta nói các e chắn lẫn nhau. Như vậy trong nguyên tử nhiều e, mỗi e đều bị chắn bởi các e còn lại và chính nó lại chắn các e khác trong nguyên tử nhưng sự chắn này không hoàn toàn.

$A = \sum_{i=1}^{n-1} A_i$ A: Hệ số chắn tổng cộng của các e còn lại đối với e xét.

n: số e có trong nguyên tử.

Ai: Hệ số chắn của e thứ i đối với e khảo sát.

Vì chắn không hoàn toàn => Ai <1.

Khi A tăng ->tác dụng chắn của e thứ i đối với e khảo sát tăng và Z' đối với e khảo sát giảm và ngược lại.

* Nhận xét về quy luật chắn:

- Các e càng xa nhân (các e có n lớn và l lớn) thì bị chắn càng nhiều và tác dụng chắn của nó đối với e càng ít (e ở xa nhân nhất là e có giá trị n và l lớn nhất).
- Các e trong cùng 1 lớp (cùng n) chắn lẫn nhau kém và theo chiều ns-np-nd-nf tác dụng chắn giảm dần, khả năng bị chắn tăng dần (A tăng).
- Các e trong cùng 1 phân lớp (cùng n,l) chắn lẫn nhau càng kém, đặc biệt các e trong cùng 1 phân lớp đầy 1 nửa, số e có spin song song nhau chắn lẫn nhau kém nhất (vì lúc này mỗi e chiếm 1 AO trong phân lớp ở xa nhất).
- Các phân lớp bão hòa e thuộc lớp bên trong mật độ e dày đặc chắn mạnh e bên ngoài.

2. Quy luật biến thiên năng lượng của các AO hóa trị EAO

Theo công thức:

$$EAO_{\text{hóa trị}} = -13{,}6\frac{(Z-A)^2}{n^2} = -13{,}6\frac{Z'^2}{n^2}$$

- ⇨ khi Z' tăng thì EAO giảm.
- ⇨ n tăng -> EAO tăng.

a. Trong 1 chu kì

- Trong 1 chu kỳ, từ trái qua phải $EAO_{\text{hóa trị}}$ giảm vì n=const, Z tăng -> Z' tăng: Z' tăng do A tăng chậm hơn Z, A tăng chậm vì từ trái qua phải trong 1 chu kỳ các e được điền vào cùng một lớp nên tácdụng chắn lẫn nhau kém (s nhỏ).

- Trong một chu kì từ trái qua phải, hiệu năng lượng giữa các AO np và ns tăng dần: $\Delta E = E_{np} - E_{ns}$ tăng .

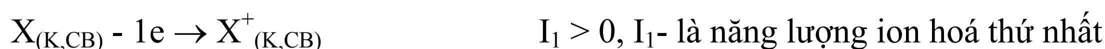
b. Trong 1 nhóm: từ trên xuống trong 1 nhóm thì:

- EAO $_{\text{hóa trị}}$ tăng dần do:
  + Z tăng nhiều từ 8-> 18, cấu trúc bão hòa e chắn mạnh với e ngoài => Z' tăng chậm hơn, n tăng nhanh hơn.
- Hiệu $\Delta E = E_{np} - E_{ns}$ giảm do n tăng nhanh.

3. Năng lượng ion hóa của nguyên tử I (eV, kJmol^{-1})

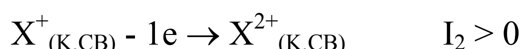
a. Năng lượng ion hóa thứ nhất: I_1

Năng lượng ion hoá thứ nhất I_1 là năng lượng tối thiểu cần thiết để tách 1e ra khỏi nguyên tử ở trạng thái cơ bản và ở thể khí thành ion tích điện +1 cũng ở trạng thái khí và cơ bản.



$X_{(K,CB)}$ - 1e $\rightarrow$ $X^{+}_{(K,CB)}$ $\quad$ $I_1 > 0$, I_1- là năng lượng ion hoá thứ nhất

Năng lượng ion hoá thứ hai ứng với quá trình bứt electront hứ hai



$X^{+}_{(K,CB)}$ - 1e $\rightarrow$ $X^{2+}_{(K,CB)}$ $\quad$ $I_2 > 0$

Ta luôn có $I_2 > I_1$

b. Electron nào bị tách khỏi nguyên tử khi bị ion hóa:

Khi nguyên tử bị ion hóa thì e liên kết yếu nhất với hạt nhân sẽ bị bứt ra trước tiên, đó là e ở lớp ngoài cùng (ứng với e có n lớn nhất) có năng lượnglớn nhất.

VD Ti (Z=22) $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^2$

e ở lớp ngoàicùng là $4s^2$ -> các e này bị tách trước tiên khi bị ion hóa, sau đó mới đến các e ở $3d^2$.

c. Các yếu tố ảnh hưởng đến năng lượng ion hoá:

Khi nguyên tử mất e tức là xảy ra hiện tượng ion hoá thì e sẽ chuyển từ các AO ra xa vô cùng. Khi đó năng lượng ion hoá ứng với quá trình mất e được tính bằng công thức:

$$I = E_{\infty} - Ee = 13,6.\frac{Z'^2}{n^2} \text{ (eV)}$$

Trong đó: E_{∞} là năng lượng của electron ở xa vô cùng = 0

Ee là năng lượng của electron bị tách

Từ biểu thức ta thấy rằng năng lượng ion hoá I phụ thuộc vào n và Z'. I càng lớn khi n nhỏ và Z' lớn. Z' phụ thuộc vào Z và A do đó I sẽ phụ thuộc vào n, l và Z.

d. Quy luật biến đổi I_1 trong 1 chu kỳ:

Trong một chu kỳ khi đi từ trái sang phải nói chung I_1 tăng dần và đạt giá trị cực đại ở khí trơ. Từ nguyên tử khí trơ của chu kỳ trước đến nguyên tử đầu tiên của chu kỳ tiếp theo I_1 lại giảm xuống đột ngột rồi lại tăng dần như chu kỳ trước. Quá trình lặp đi lặp lại từ chu kỳ này sang chu kỳ khác và được gọi là sự tuần hoàn của I_1.

Giải thích: Trong 1 chu kì, từ trái qua phải thì Ee giảm -> I_1 tăng do n=const , Z' tăng dần (Z tăng mạnh hơn A).

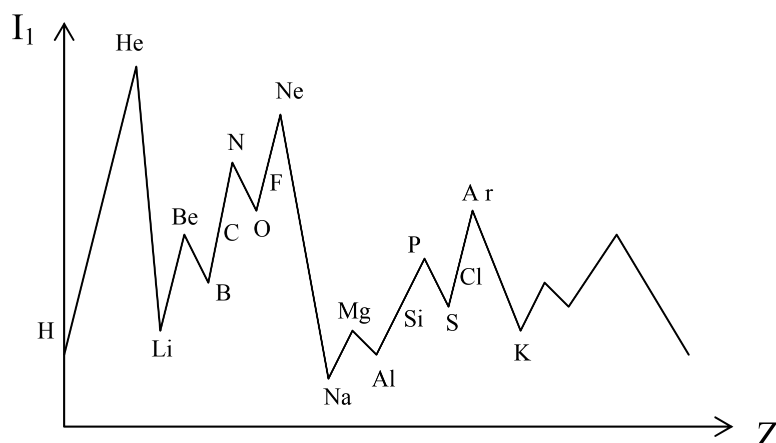
I_1 min ở đầu chu kỳ ns^1

I_1 max ở cuối chu kỳ ns^2np^6

Vì với ns^1 lớp bên trong bão hòa-> chắn tốt-> I_1 min.

ns^2np^6 bão hòa -> khó tách e ->I_1 max.

Vì n = const Z' tăng dần, tuy nhiên I_1 tăng không đều vì thấy xuất hiện những cực tiểu nhỏ (bên trong một chu kỳ) ở những nguyên tố có phân lớp ngoài cùng đã được phân bố đầy (ns^2) hoặc đầy một nửa electron (np^3).



Các cực tiểu nhỏ xuất hiện bên trong mỗi chu kỳ, nên đây là sự tuần hoàn nội chu kỳ của năng lượng ion hoá thứ nhất.

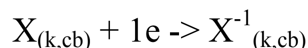
Trong một phân nhóm chính khi đi từ trên xuống giá trị I_1 giảm dần, còn trong một phân nhóm phụ sự biến thiên này chậm và không đều.

e. Quy luật biến đổi I_1 trong nhóm:

Trong một phân nhóm chính khi đi từ trên xuống giá trị I_1 giảm dần, còn trong một phân nhóm phụ sự biến thiên này chậm và không đều.

4. ái lực đối với e của nguyên tử A (eV,kJ)

Là khả năng kết hợp electron của nguyên tử để tạo thành ion âm, nó ứng với quá trình:



$$X_{(k,cb)} + 1e \rightarrow X^{-1}_{(k,cb)}$$

Vậy: Năng lượng kết hợp electron là năng lượng thoát ra hay thu vào khi kết hợp thêm 1e vào nguyên tử trung hoà ở trạng thái khí, cơ bản.

- Khác với năng lượng ion hoá thì năng lượng kết hợp electron có thể âm, dương hoặc bằng 0. ái lực với electron càng lớn thì năng lượng kết hợp electron càng nhỏ.
- Trong một chu kỳ ái lực với electron tăng dần và đạt cực đại ở các nguyên tố nhóm VIIA

5. Độ âm điện của nguyên tố (χ)

Định nghĩa: là đại lượng đặc trưng cho khả năng hút cặp e liên kết của nguyên tử trong phân tử.

- Công thức tính χ theo phương pháp Miliken:

$$\chi = \frac{I_X + A_X}{2}$$

Ix,AX: năng lượng ion hóa và ái lực e của nguyên tử X.

Tổng (Ix+AX) càng lớn => khả năng hút e của nguyên tử càng lớn.

6. Tính kim loại và phi kim:

- Tính kim loại: Là tính dễ nhường electron

Một nguyên tố có số e lớp ngoài cùng < 4 là kim loại trừ B (Z = 5) và H (Z=1), đó là các nguyên tố nhóm IA, IIA, IIIA. Một số nguyên tố kim loại có số e lớp ngoài cùng là 4 như Ge, Sn, Pb; có số e hoá trị là 5 như Bi, Sb.

- Tính phi kim: Là tính dễ nhận e

Các nguyên tố có số e lớp ngoài cùng > 3 là nguyên tố phi kim

Đó là các nguyên tố nhóm IVA, VA, VIA, VIIA trừ Sn, Pb, Ge (IVA), Sb, Bi(VA) là các kim loại.

- Quy luật biến đổi:

Trong một chu kỳ khi đi từ đầu đến cuối chu kỳ tính kim loại giảm dần, còn tính phi kim tăng dần.

Trong một phân nhóm chính từ trên xuống tính kim loại tăng dần còn tính phi kim giảm dần. Trong phân nhóm phụ đi từ trên xuống tính kim loại giảm dần.

7. Số ôxi hóa của nguyên tố

Khi tương tác hoá học luôn xảy ra sự di chuyển electron hoá trị từ nguyên tử này sang nguyên tử khác. Chính sự di chuyển này xác định số oxi hoá của nguyên tử tham gia tương tác.

Nguyên tử mất e hoá trị sẽ tích điện dương và do đó nó sẽ có số oxi hoá (+). Số oxi hoá (+) = số e hoá trị mất. Nguyên tử thu e hoá trị sẽ tích điện âm, do đó có số oxi hoá (-). Như vậy, số oxi hoá = số e hoá trị nhường hoặc nhận.

Số oxi hoá cao nhất của một nguyên tố = số thứ tự nhóm của nó trừ F, O, các nguyên tố nhóm IB, VIIIB.

Số oxi hoá âm thường chỉ có ở các nguyên tố phi kim từ IVA đến VIIA. Số oxi hoá âm thấp nhất của các phi kim = số thứ tự nhóm - 8

Ví dụ: số oxi hoá âm thấp nhất của các halogen nhóm VIIA là = 7-8 = -1
số oxi hoá âm thấp nhất của các nguyên tố nhóm VIA là = 6-8 = -2
số oxi hoá cao nhất của các nguyên tố nhóm VA, VB là +5
số oxi hoá cao nhất của các nguyên tố nhóm VIIA (trừ F), VIIB là +7

IV. Mối liên hệ giữa cấu tạo nguyên tử với vị trí và tính chất của các nguyên tố trong bảng tuần hoàn

1. Biết cấu tạo vỏ electron suy ra vị trí và tính chất

Ví dụ 1: Nguyên tố có Z = 22

Biết Z viết cấu hình electron: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^2 4s^2$

- Lớp ngoài cùng có n= 4 nên nguyên tố ở chu kỳ 4

- Các electron cuối cùng đang được điền ở phân lớp d nên là nguyên tố d và thuộc nhóm B

- Tổng số e ở phân lớp ns + số e ở phân lớp (n-1)d = 4 nên nguyên tố thuộc nhóm IVB
- Vì có số e lớp ngoài cùng = 2 < 4 nên là kim loại

Ví dụ 2: Nguyên tố có Z = 35

Cấu hình electron của nguyên tố là: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^5$

- Nguyên tố thuộc chu kỳ 4 vì có 4 lớp electron
- Đây là nguyên tố p vì các e cuối cùng đang điền ở phân lớp 4p
- Số e lớp ngoài cùng = 7 > 3 là phi kim, thuộc nhóm VIIA

2. Biết vị trí trong bảng tuần hoàn suy ra cấu tạo vỏ electron

Ví dụ 1: Nguyên tố X, chu kỳ III, nhóm VIIA

- Vì nguyên tố ở chu kỳ III nên có 3 lớp electron
- Vì ở nhóm VIIA nên cấu trúc lớp e ngoài cùng là ns^2np^5
- Cấu hình electron: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^5$

Ví dụ 2: Nguyên tố A ở chu kỳ IV, nhóm VIIB

- Vì ở chu kỳ IV nên có 4 lớp vỏ electron $\rightarrow$ n = 4
- Nhóm VIIB, cấu trúc lớp vỏ electron ngoài cùng là: $(n-1)d^5ns^2$: $3d^5 4s^2$
- Cấu trúc vỏ electron: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^5 4s^2$

CHƯƠNG III
LIÊN KẾT HOÁ HỌC VÀ CẤU TẠO PHÂN TỬ

A - Liên kết hoá học

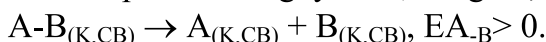
I. Các đặc trưng cơ bản của liên kết hoá học

1. Năng lượng liên kết (E):

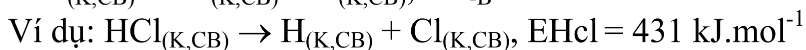
(ở đây quy ước E ứng với quá trình phá vỡ liên kết)

Năng lượng liên kết là năng lượng ứng với quá trình phá vỡ liên kết, do đó năng lượng liên kết càng lớn thì liên kết càng bền.

Đối với phân tử 2 nguyên tử, năng lượng liên kết ứng với quá trình:

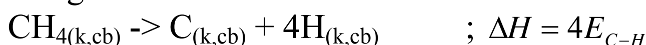


$A\text{-}B_{(K,CB)} \rightarrow A_{(K,CB)} + B_{(K,CB)}$, $E_{A\text{-}B} > 0$.



Ví dụ: $HCl_{(K,CB)} \rightarrow H_{(K,CB)} + Cl_{(K,CB)}$, $E_{HCl} = 431$ kJ.mol^{-1}

Đối với phân tử nhiều nguyên tử kiểu ABn, như CH_4 -> dùng kí hiệu năng lượng liên kết trung bình.

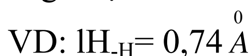


$CH_{4(k,cb)} \rightarrow C_{(k,cb)} + 4H_{(k,cb)}$; $\Delta H = 4E_{C-H}$

=> $E_{C-H} = \frac{1}{4}\Delta H = 416$ (kJ.mol^{-1})

2. Độ dài liên kết:

Là khoảng cách giữa hai tâm của hai nguyên tử tham gia liên kết. Độ dài liên kết thường được tính bằng nanomet (nm) hoặc anstron (A^0).



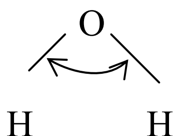
VD: $l_{H\text{-}H} = 0,74\ \overset{0}{A}$

=> l tăng -> độ bền liên kết giảm và ngược lại.

3. Góc liên kết:

Là góc tạo bởi một nguyên tử liên kết trực tiếp với hai nguyên tử khác trong phân tử.

Ví dụ: Oxy tạo hai liên kết với hai nguyên tử H trong phân tử H_2O. Góc liên kết HOH trong phân tử nước là $104,5^0$



II. Phân loại liên kết

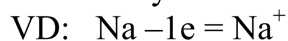
Dựa vào độ chênh lệch về χ giữa 2 nguyên tử tham gia liên kết ($\Delta\chi$).

1.Liên kết ion

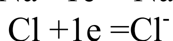
- **Điều kiện tạo thành:** Khi hai nguyên tử tham gia liên kết có sự chênh lệch về độ âm điện là $\Delta\chi \geq 2$. Khi đó cặp e hoá trị sẽ chuyển hẳn từ nguyên tử có độ âm điện nhỏ hơn sang nguyên tử có độ âm điện lớn hơn, do đó sẽ hình thành ra các ion ngược dấu. Sau đó các ion ngược dấu sẽ liên kết với nhau bằng lực hút tĩnh điện của các ion ngược dấu.

Vậy bản chất của liên kết ion là lực tĩnh điện giữa các ion trái dấu.

⇨ xảy ra bởi 1 kim loại điển hình và 1 phi kim điển hình.



VD: $Na - 1e = Na^+$



$Cl + 1e = Cl^-$

⇨ hình thành liên kết ion trong NaCl.

- Đặc điểm liên kết:

- Liên kết ion không có tính định hướng: Mỗi ion có thể tạo ra một điện trườngxung quanh nó, do đó liên kết ion được hình thành theo mọi hướng
- Liên kết ion không có tính bão hoà, vì vậy mỗi ion có thể hút được nhiều ion xung quanh nó
- Liên kết ion là liên kết bền, năng lượng của liên kết ion cỡ kJ trở lên.

Do các đặc điểm trên ở điều kiện thường các hợp chất liên kết ion là các chất rắn. Gồm vô số các ion âm và dương liên kết với nhau theo những trật tự nhất định

Ví dụ: Các muối, các oxit và hydroxit kim loại

2.Liên kết cộng hóa trị:

- Liên kết cộng hóa trị phân cực: Nếu $\Delta\chi < 2$ => cặp e liên kết lệch về phía nguyên tử của nguyên tố có χ lớn hơn.

VD : HCl, SO_2..

- Liên kết cộng hóa trị không phân cực: Khi $\Delta\chi = 0$ -> cặp e liên kết không bị lệch.

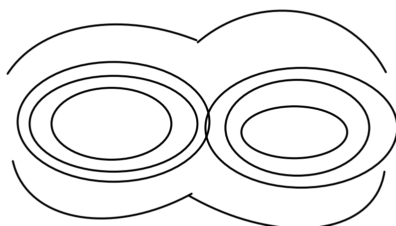
VD H_2.,...

III. Liên kết cộng hoá trị. Phương pháp cặp electron liên kết

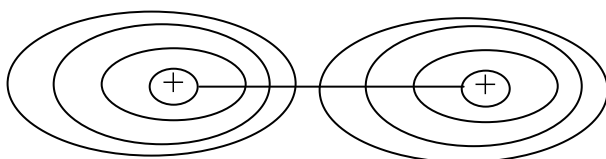
1. Sự tạo thành phân tử hydro từ hai nguyên tử H:

Năm 1927 hai nhà Bác học Heitler và London đã áp dụng cơ học lượng tử để giải bài toán tính năng lượng liên kết trong phân tử H_2. Kết quả cho thấy:

- Liên kết giữa hai nguyên tử H được hình thành khi 2 electron của hai nguyên tử có spin ngược dấu
- Khi hình thành liên kết, mật độ mây electron ở khu vực không gian giữa hai hạt nhân tăng lên. Do đó điện tích âm của mây electron sẽ có tác dụng hút hai hạt nhân và liên kết chúng lại với nhau.



- Nếu hai electron có spin cùng dấu thì mật độ mây electron ở khu vực giữa hai hạt nhân giảm xuống, mật độ electron ở khu vực ngoài hai hạt nhân tăng lên và các mây này có tác dụng đẩy nhau làm hai hạt nhân tách xa nhau.=> không hình thành liên kết.

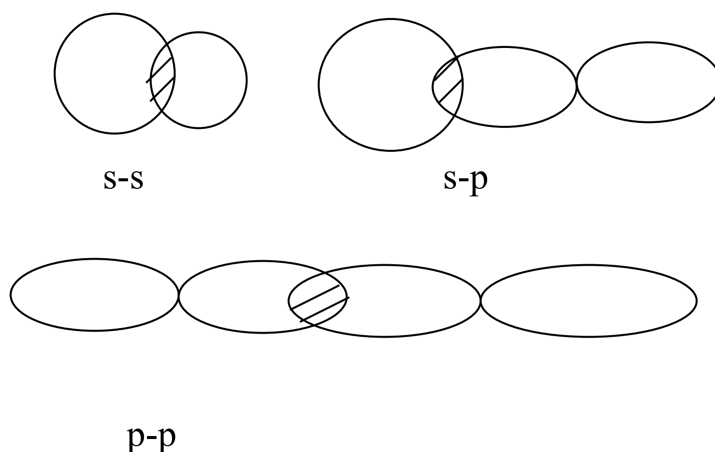


Như vậy, phân tử H_2 được hình thành là do sự ghép đôi của 2e có spin ngược chiều nhau. Sau đó, người ta đã khái quát hoá các kết quả trên và mở rộng thành phương pháp cặp e liên kết áp dụng cho mọi phân tử.

2. Nội dung cơ bản của phương pháp cặp e liên kết

- Mỗi liên kết cộng hoá trị được hình thành là do sự ghép đôi của 2e độc thân có spin ngược dấu của 2 nguyên tử tham gia liên kết. Khi đó xảy ra sự xen phủ giữa hai mây electron liên kết
- Khi hai mây electron xen phủ nhau càng mạnh thì liên kết càng bền (Độ xen phủ càng mạnh khi các mây electron tham gia xen phủ có năng lượng càng xấp xỉ nhau)
- Liên kết cộng hoá trị là liên kết có hướng. Hướng của liên kết này là hướng có độ xen phủ các mây electron của 2 nguyên tử tham gia liên kết là lớn nhất

Ví dụ: Sự xen phủ các mây s và s, s và p, p và p



3.Hoá trị của nguyên tố theo phương pháp cặp electron liên kết

Từ tiên đề 1 của phương pháp cặp electron liên kết ta thấy rằng: Hoá trị có thể có của một nguyên tố được tính bằng số e độc thân. Dựa vào điều này ta có thể giải thích được hoá trị 1 của nguyên tử H, hoá trị 3 của nguyên tử N, hoá trị 2,4 của C.

Ví dụ 1: H có 1e: $1s^1 \rightarrow$ H có 1e độc thân nên có hoá trị 1

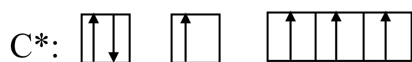
N: $1s^2 2s^2 2p^3$

$\rightarrow$ N có 3e độc thân nên có hoá trị 3

C: $1s^2 2s^2 2p^2$

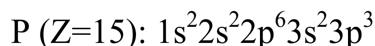
$\rightarrow$ C có 2e độc thân nên có hoá trị 2

ở trạng thái cơ bản C có 2e độc thân nên có hoá trị 2 (ví dụ phân tử CF_2), tuy nhiên C còn có hoá trị 4 (trong phân tử CH_4, CCl_4). Điều này được giải thích như sau: Khi được cung cấp năng lượng thì 1e đã ghép đôi ở phân lớp 2s sẽ chuyển sang ô trống của phân lớp 2p, làm cho số e độc thân của nguyên tử C tăng lên, trạng thái này của nguyên tử C được gọi là trạng thái kích thích. *Trạng thái kích thích là trạng thái của nguyên tử có được khi nhận thêm năng lượng, khi đó xảy ra hiện tượng tách các cặp e để chuyển 1e sang obitan còn trống thuộc cùng một lớp.* Năng lượng tiêu tốn để chuyển nguyên tử từ trạng thái cơ bản sang trạng thái kích thích được bù bằng năng lượng giải phóng khi hình thành mối liên kết hoá học.

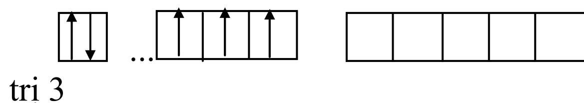
C*: 

ở trạng thái kích thích số e độc thân của C là 4 và do đó có hoá trị 4

Ví dụ 2: Xác định các hoá trị có thể có của P bằng phương pháp cặp e liên kết

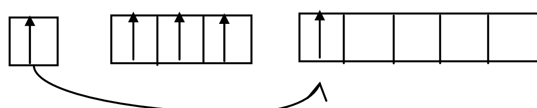


P (Z=15): $1s^22s^22p^63s^23p^3$



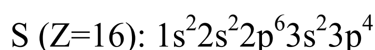
Trạng thái cơ bản có 3e độc thân có hoá trị 3

Khi được cung cấp thêm năng lượng thì 1e được ghép đôi ở ocbitan 3s sẽ chuyển sang 1 obitan trống ở 3d, làm số e độc thân của nguyên tử P là 5, trạng thái này của nguyên tử P là trạng thái kích thích.

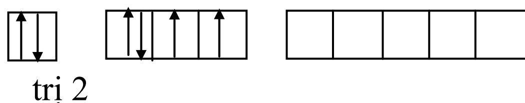


ạng thái kích thích có 5e độc thân có hoá trị 5

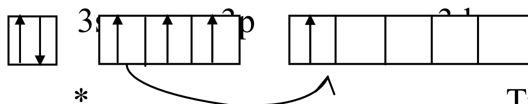
Xác định các trạng thái cộng hoá trị có thể có của S



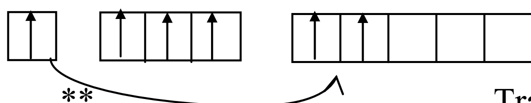
S (Z=16): $1s^22s^22p^63s^23p^4$



Trạng thái cơ bản có 2e độc thân có hoá trị 2



* Trạng thái kích thích * có 4e độc thân có hoá trị 4



** Trạng thái kích thích ** có 6e độc thân có hoá trị 6

Chú ý:

- Sự dịch chuyển electron đòi hỏi tiêu tốn năng lượng, nên sự dịch chuyển chỉ xảy ra trong cùng một lớp, từ phân lớp này sang phân lớp khác (ns →np, nd, np → nd). Năng lượng tiêu tốn được đền bù bằng năng lượng tạo liên kết. Sự dịch chuyển electron từ lớp này sang lớp khác không thể xảy ra được, vì tiêu tốn năng lượng quá lớn không thể đền bù bằng năng lượng giải phóng khi hình thành liên kết
- Các nguyên tố phân nhóm chính, đặc biệt với nguyên tố ở chu kỳ II, lớp ngoài cùng (n=2) có 4 obitan nên các nguyên tố này chỉ có hoá trị lớn nhất là 4. Các nguyên tố thuộc chu kỳ III có 3 phân lớp ngoài cùng là s, p, d nên các nguyên tố này có thể có hoá trị > 4 (P có hoá trị 3, 5; S có hoá trị 2, 4, 6; Cl có hoá trị 1, 3, 5, 7)

- Phương pháp tìm hoá trị của nguyên tố bằng phương pháp cặp e liên kết chỉ đúng đối với các nguyên tố nhóm A (trừ các khí hiếm).

Từ các ví dụ trên ta thấy rằng số liên kết cộng hoá trị của 1 nguyên tố là có hạn, nghĩa là có tính bão hoà (điều này khác với trường hợp liên kết ion).

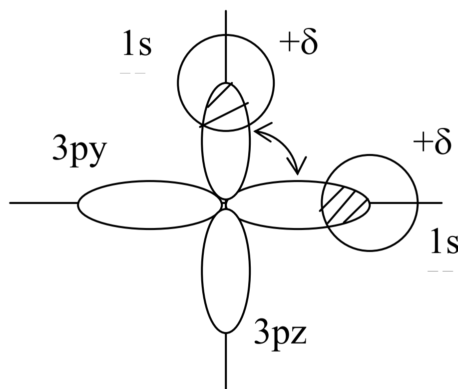
4. Tính định hướng của liên kết cộng hoá trị

Các nguyên tử trong phân tử liên kết với nhau theo hướng có sự xen phủ các mây electron là lớn nhất, đó chính là tính định hướng của liên kết cộng hoá trị. Từ tính định hướng này ta có thể dự đoán được cấu hình hình học của phân tử.

Ví dụ: Phân tử H_2S

H: $1s^1$
S: $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^4$

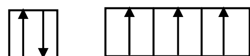
Hai e độc thân ở 3p của S sẽ tạo liên kết với 2e độc thân của hai nguyên tử H, để sự xen phủ là cực đại thì các AO phải định hướng theo trục liên kết như nhau. Do đó hình dạng các mây xen phủ sẽ quyết định cấu hình hình học của phân tử, do đó góc HSH = 90^o, nhưng vì yếu tố khác như lực đẩy tĩnh điện (sự phân cực của S, H) xuất hiện nên thực tế góc HSH là $92^o2'$, giải thích tương tự góc HSeH = 91^o, HTeH = 90^o.



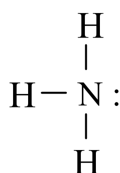
5. Liên kết cho - nhận

Liên kết cho - nhận cũng là liên kết cộng hoá trị. Liên kết cho - nhận được hình thành do một cặp e không phân chia của một nguyên tử với 1 AO hoá trị trống của 1 nguyên tử khác. Cặp e dùng chung để tạo liên kết chỉ do một nguyên tử (ion) cung cấp.

Ví dụ:

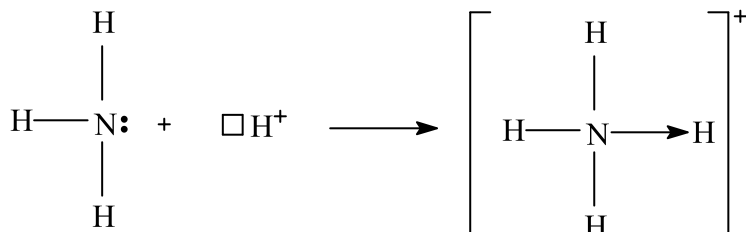
N: $1s^2 2s^2 2p^3$ 

3e độc thân của N sẽ ghép đôi với 3e độc thân của 3 nguyên tử H tạo thành 3 liên kết N-H. Như vậy, trong phân tử NH_3 còn 1 cặp e chưa phân chia



H^+: 1so có AO hoá trị trống 1s

Khi NH_3 tiến gần tới H^+ nó sẽ bị rơi vào trường tác dụng của H^+, H^+ sẽ hút cặp e chưa phân chia của N tạo thành một liên kết N-H thứ tư được tạo ra bởi một cặp e chưa chia của N và 1AO hoá trị trống của H^+. Liên kết này là liên kết cho - nhận, được ký hiệu bằng một mũi tên (→) di từ nguyên tố cho cặp e đến nguyên tố nhận cặp e.



Sự hình thành phân tử BF_4^-, H_3O^+ đều được giải thích tương tự, 1 liên kết B-F và 1 liên kết H-O được hình thành do sự cho- nhận.

Bằng thực nghiệm người ta xác nhận được rằng 4 liên kết N-H trong phân tử NH_4^+ hoặc phân tử BF_4^- giống hệt nhau nên liên kết cho- nhận là liên kết cộng hoá trị.

6. Cộng hoá trị cực đại

Liên kết cộng hoá trị được tạo thành do:

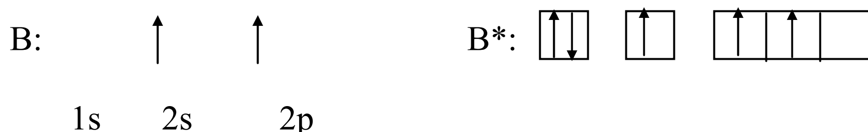
- Các e độc thân chưa ghép đôi
- Một cặp e chưa phân chia
- ô lượng tử trống

Số liên kết cộng hoá trị mà nguyên tử có khả năng tạo thành (còn gọi là cộng hoá trị cực đại) bằng số ô lượng tử của nguyên tử có khả năng tham gia liên kết (= số AO hoá trị) (bao gồm ô lượng tử có 1e độc thân, 1 cặp e không phân chia hay ô lượng tử trống).

Ví dụ 1:

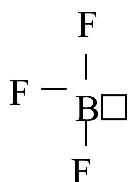
Các nguyên tử ở chu kỳ II có 4 ô lượng tử hoá trị có khả năng tham gia liên kết là 2s, 2px, 2py, 2pz nên cộng hoá trị cực đại của chúng là 4.

Ví dụ 2: B (Z=5): $1s^2 2s^2 2p^1$



1s 2s 2p

B ở trạng thái kích thích có 3e độc thân, sẽ tạo được ba liên kết B-F, hình thành phân tử BF_3



Ngoài ra, nguyên tố B còn 1 obitan trống, sẽ tạo được liên kết B-F thứ tư là liên kết cho - nhận, hình thành phân tử BF_4^-: Có cộng hoá trị cực đại là 4

C (Z = 6): $1s^2 2s^2 2p^2$:

C*:  Có 4e độc thân, nên tạo được 4 liên kết C-H

N (Z= 7): $1s^2 2s^2 2p^3$ Có 3e độc thân → tạo được 3 liên kết N-H, hình thành được phân tử NH_3, tuy nhiên trong nguyên tử N còn 1 cặp e chưa phân chia, có thể tạo thành phân tử NH_4^+: N có cộng hoá trị cực đại là 4

IV. Thuyết lai hóa

1.Điều kiện ra đời của thuyết lai hóa

Thuyết lai hoá ra đời nhằm giải quyết được hai khó khăn của phương pháp cặp electron liên kết. Cho phép giải thích được cấu trúc hình học và độ bền của liên kết

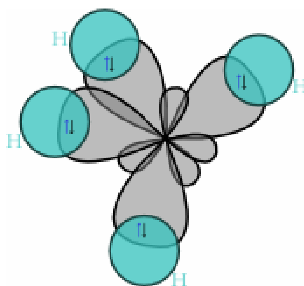
VD Xét sự hình thành CH_4

C(Z=6) $1s^2 2s^2 2p^2$

ở trạng thái kích thích C* 

theo phương pháp cặp e liên kết thì 4e độc thân của C^* sẽ tạo thành 4 liên kết C-H, trong đó có:

- 3 liên kết p-s: 3AO 2p của C xen phủ với 3 AO 1s của 3 nguyên tử H →tạo 3 góc liên kết HCH =90^0.
- 1 liên kết C-H thứ 4 tạo thành do sự xen phủ các AO hóa trị của 2s của C và 1s của H (s-s) không có hướng xác định trong không gian (vì mức độ xen phủ các AO s với nhau là như nhau theo mọi hướng). Nếu coi liên kết này phải cách đều 3 liên kết kia thì góc liên kết HCH thứ tư phải bằng $125^0 14'$. Kết quả này còn dẫn đến độ bền của 1 liên kết C-H (do xen phủ s-s) này khác với độ bền của 3 liên kết C-H còn lại (do xen phủ p-s). (phương pháp cặp e không giải thích được sự khác nhau này)
- Tuy nhiên thực nghiệm chứng tỏ rằng 4 góc liên kết HCH đều bằng $109^0 28'$ (bằng góc tứ diện đều) và độ bền của 4 liên kết C-H đều bằng nhau.
- Giải để giải quyết 2 khó khăn này của phương pháp cặp e liên kết-> phải dùng thuyết lai hóa: giả thiết rằng khi tạo liên kết thì 1 AO 2s và 3AO 2p của C lai hóa (trộn lẫn) với nhau tạo thành 4AO lai hóa sp^3 giống hệt nhau hướng tới 4 đỉnh của hình tứ diện đều, ở đó chúng xen phủ với 4AO 1s của 4 nguyên tử H. Vậy 4 liên kết C-H fải giống nhau và còn phải bằng góc của hình tứ diện đều mà nguyên tử C nằm ở tâm của hình này.



Cấu hình phân tử CH_4 theo thuyết lai hóa

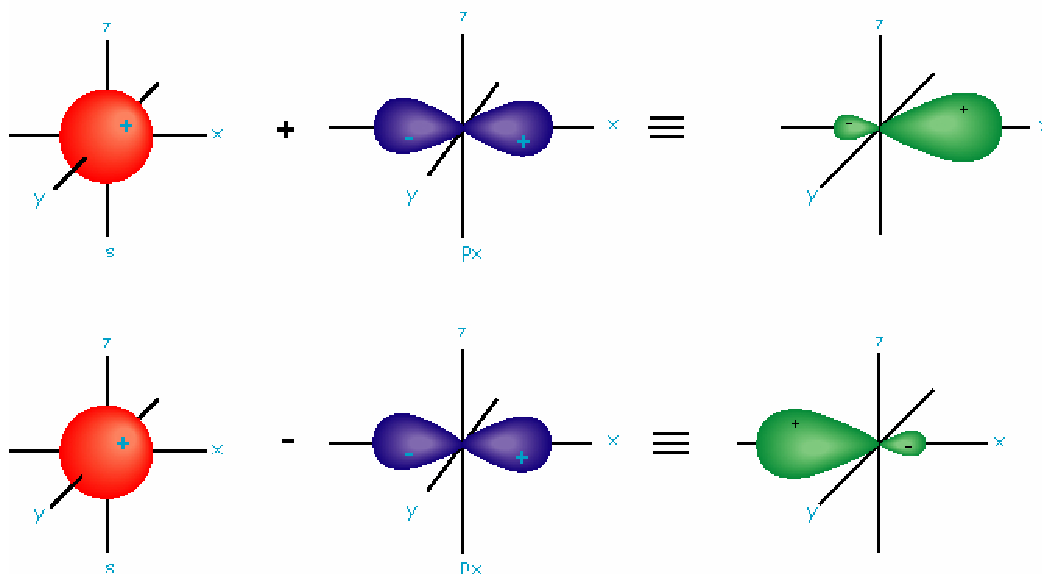
2. Nội dung thuyết lai hóa:

Lai hóa AO là sự tổ hợp các AO hóa trị của 1 nguyên tử để tạo thành 1 số tương đương các AO mới có cùng năng lượng định hướng xác định trong không gian và được dùng để tạo liên kết bền hơn. Các AO tham gia tổ hợp có thể có 1e, 2e hoặc là 1 ô lượng tử trống.

3. Các kiểu lai hóa

a.Lai hóa sp

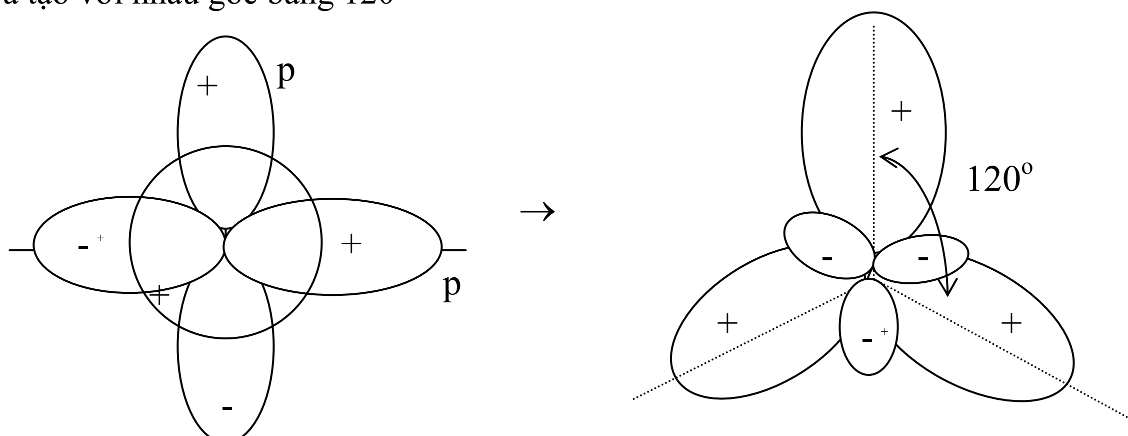
1AOs + 1AOp → 2AO lai hoá sp. 2AO lai hoá này định hướng thẳng hàng với nhau và tạo với nhau một góc bằng 180^o



Ví dụ: Dạng lai hoá này gặp trong nguyên tử Be của phân tử BeF_2, BeH_2, $BeCl_2$, nên các phân tử này có dạng thẳng.

b. Lai hoá kiểu sp^2:

1AOs + 2AOp → 3AO lai hoá sp^2. 3AO lai hoá này nằm trong cùng một mặt phẳng và tạo với nhau góc bằng 120^o



Ví dụ: Kiểu lai hoá này gặp trong nguyên tử B của phân tử BF_3, BCl_3

c. Lai hoá kiểu sp^3:

1AOs + 3AOp → 4 AO lai hoá sp^3. 4 AO lai hoá này định hướng từ tâm tới 4 đỉnh của tứ diện đều, góc tạo thành giữa các AO lai hoá là 109^{o}28'.



Ví dụ: Gặp trong nguyên tử O của phân tử H_2O, nguyên tử N của phân tử NH_3 và ion NH_4^+

4. Điều kiện lai hoá bền:

Lai hoá của nguyên tử là bền khi thảo mãn các điều kiện sau đây:

? Các AO nguyên tử tham gia lai hoá phải có năng lượng xấp xỉ nhau. Như vậy, trong một chu kỳ đi từ đầu đến cuối chu kỳ thì hiệu các mức năng lượng Enp- Ens lớn dần lên. Do đó đi từ đầu đến cuối chu kỳ hiệu quả lai hoá kém dần.

Ví dụ: ở chu kỳ II hiệu quả lai hoá của các AO(2s) và AO(2p) đối với các nguyên tử ở đầu chu kỳ như Be, B, C rất tốt. Đối với nguyên tố Be có lai hoá sp và góc giữa các AO lai là 180^o, đối với B có lai hoá sp^2 và góc giữa các AO lai là 120^o, đối với C có lai hoá sp^3 và góc giữa các AO lai là $109^o28'$

? Năng lượng của các AO tham gia lai hoá phải thấp. Do đó các AO ở lớp thứ hai (2s, 2p) tham gia lai hoá có hiệu quả hơn, còn các AO ở lớp thứ ba (3s, 3p) hiệu quả lai hoá kém hơn, lớp thứ tư (4s, 4p) lai hoá không đáng kể.

Ví dụ: trong dãy H_2O - H_2S- H_2Se- H_2Te hiệu quả lai hoá giảm dần nên góc liên kết giảm dần theo dãy $104^o5'$ - $92^o2'$- 91^o - 90^o

? Độ xen phủ của các AO lai hoá với các AO nguyên tử khác tham gia liên kết phải lớn.

5. **Dự đoán kiểu lai hoá và cấu trúc hình học**

Để chọn kiểu lai hoá cho nguyên tử trung tâm dựa vào n là tổng số liên kết σ của nguyên tử trung tâm với số cặp e hóa trị không phân chia.

Nếu tổng đó bằng 2 thì nguyên tử trung tâm có lai hoá dạng sp
Nếu tổng đó bằng 3 thì nguyên tử trung tâm có lai hoá dạng sp^2
Nếu tổng đó bằng 4 thì nguyên tử trung tâm có lai hoá sp^3

-Khi đã biết được kiểu lai hóa của nguyên tử trung tâm trong phân tử-> chưa xác định được cấu hình hình học của phân tử. Vì cấu hình hình học của phân tử phụ thuộc vào:

+ Dạng lai hóa của của nguyên tử trung tâm.
+ Số liên kết σ của nguyên tử trung tâm với các nguyên tử xung quanh.
+Số cặp e hóa trị của nguyên tử trung tâm chưa liên kết.

⇨ Muốn biết cấu hình hình học của 1 phân tử=> phải biết 3 yếu tố trên.

Cụ thể:
n=2: -> lai hóa sp: cấu trúc thẳng -> góc 180^0
n=3: -> lai hóa sp^2: nếu có 3 liên kết σ + 0 cặp e hóa trị chưa liên kết → tam giác
nếu có 2 liên kết σ + 1 cặp e hóa trị chưa liên kết -> cấu trúc góc.
n=4: -> lai hóa sp^3: nếu có 4 liên kết σ + 0 cặp e hóa trị chưa liên kết → tứ diện
nếu có 3 liên kết σ + 1 cặp e hóa trị chưa liên kết -> tháp tam giác.
nếu có 2 liên kết σ + 2 cặp e hóa trị chưa liên kết -> cấu trúc góc.

Ví dụ:
BeH_2 ; Nguyên tử trung tâm Be (Z=4)
n= số liên kết σ + số cặp e hóa trị chưa liên kết
=2 +0 =2 => Be có lai hóa sp => phân tử có dạng đường thẳng.

Tương tự ta có:
CH_4 - C có lai hoá sp^3- cấu trúc hình học là tứ diện đều
NH_3 - N có lai hoá sp^3 - cấu trúc hình học là tháp tam giác
H_2O - O có dạng lai hoá sp^3 - cấu trúc dạng góc

6. Đánh giá ưu khuyết điểm của phương pháp liên kết hóa trị:

- Giải thích đơn giản, dễ hiểu, cho phép giải thích cấu trúc hình học của nhiều phân tử

- Không giải thích được sự tồn tại của một số ion như: H_2^+, O_2^+, NO^+, không giải thích được tính thuận từ, nghịch từ của phân tử O_2
- Không có tính định đề (không chứng minh được)

V. Phương pháp MO-LCAO (phương pháp MO - tổ hợp tuyến tính các AO- Phương pháp obitan phân tử)

Nguyên tắc: Mở rộng hàm sóng cho phân tử.

1.Những giả thiết cơ bản của phương pháp MO-LCAO

- Coi mỗi electron chuyển động trong 1 trường gây ra bởi các hạt nhân và tất cả các electron còn lại, được gọi là trường tự hợp (khác với trường của nguyên tử, trường này không đối xứng cầu).
- Trạng thái của electron được mô tả bởi một hàm sóng Φ hay còn gọi là obitan phân tử MO.
- Các electron của lớp trong của mỗi nguyên tử không thuộc về toàn bộ phân tử mà chỉ thuộc về nguyên tử đó mà thôi, nên không tạo thành MO, có nghĩa là chỉ có các electron hoá trị mới tham gia tạo thành các MO.

Bài toán đưa về giải phương trình Shrodinger có dạng: $H\Phi = E\Phi$

Trong đó H là toán tử Hamilton, E là giá trị riêng của năng lượng, Φ- là hàm sóng mô tả trạng thái của 1e trong phân tử.

Giải phương trình này sẽ tìm được năng lượng của e trong phân tử (E) và hàm sóng Φ tương ứng. Sau đó xây dựng giản đồ năng lượng và viết cấu hình e của phân tử: Việc phân bố e vào các MO giống hệt như quy luật phân bố các e vào AO, tức là tuân theo nguyên lý vững bền, nguyên lý loại trừ Pauli và quy tắc Hund.

2. Nội dung cơ bản của sự tạo thành MO bằng phương pháp LCAO(Phương pháp tổ hợp tuyến tính các AO).

Theo phương pháp này thì MO được xác định bằng phương pháp tổ hợp tuyến tính các AO nguyên tử dựa trên giả thuyết sau đây:

Xét phân tử gồm hai nguyên tử 1 và 2:

- Khi electron chuyển động gần nguyên tử 1 thì nó chịu tác dụng chủ yếu của nguyên tử 1, do đó obitan phân tử có dạng tương tự như AO của nguyên tử 1 là Ψ_1 nhưng chịu sự nhiễu loạn gây ra bởi nguyên tử 2 nên phải có một hệ số bổ sung vào biểu thức xác định MO
- Khi electron chuyển động gần nguyên tử 2 thì nó chịu tác dụng chủ yếu của nguyên tử 2, do đó obitan phân tử có dạng tương tự như AO của nguyên tử 2 là Ψ_2 đồng thời chịu sự nhiễu loạn gây ra bởi nguyên tử 1
- Từ đây thấy rằng hàm tốt nhất để mô tả trạng thái của electron trong phân tử sẽ là tổ hợp tuyến tính của các AO: $\Phi = C_1.\ \Psi_1 + C_2.\ \Psi_2$
- Đưa $\Phi = C_1.\ \Psi_1 + C_2.\ \Psi_2$ vào phương trình Schrodinger, giải ra ta sẽ tìm được Φ và năng lượng E tương ứng

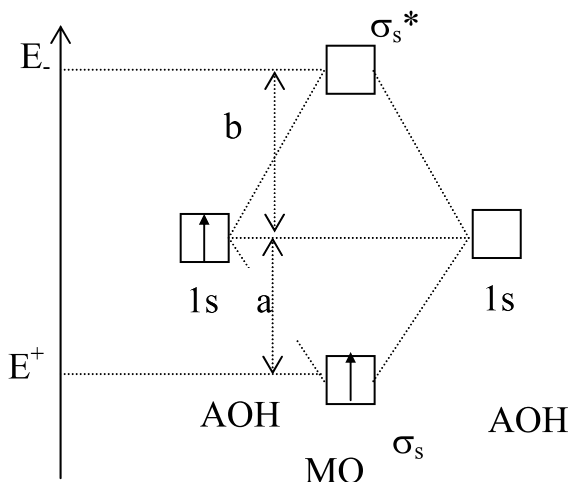
Ví dụ: Xét trường hợp đơn giản nhất là ion H_2^+. Hệ gồm hai hạt nhân giống hệt nhau

AO hoá trị của nguyên tử 1 là 1s được đặc trưng bởi hàm sóng Ψ_1, AO hoá trị của nguyên tử 2 là 1s được đặc trưng bởi hàm sóng Ψ_2. Khi đó $\Phi = C_1.\ \Psi_1 + C_2.\ \Psi_2$ là hàm mô tả trạng thái của electron trong phân tử H_2^+. Thay biểu thức Φ vào phương trình Schrodinger, giải phương trình sẽ xác định được biểu thức của MO

- MO thứ nhất là $\Phi_{+} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_1 + \Psi_2)$ với năng lượng tương ứng là E_{+}, năng lượng này thấp hơn năng lượng của các AO
- MO thứ hai là $\Phi_{-} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Psi_1 - \Psi_2)$ với năng lượng tương ứng là E_{-}, năng lượng này cao hơn năng lượng của các AO.

Φ_{+} là MO liên kết σ_s; Φ_{-} là MO phản liên kết MO*, σ_s^*

Sự tổ hợp của các AO thành MO thường được biểu diễn dưới dạng giản đồ năng lượng



H_2^+ chỉ có 1e duy nhất được điền vào σ_s. Điều đó có nghĩa là khi tạo thành ion H_2^+ năng lượng đã giảm xuống một giá trị là a, nghĩa là hệ H_2^+ bền hơn hệ H và H^+ ở riêng biệt.

Cấu hình electron của H_2^+: σ_s^1

Tính bậc liên kết: $\rho = \frac{N - N^*}{2}$

Trong đó: ρ - Bậc của liên kết hay độ bội của liên kết

N - là số electron trên các MO liên kết

N* - là số electron trên các MO phản liên kết

$\rho = \frac{N - N^*}{2} = \frac{1-0}{2} = 1/2 \neq 0$ ➔ ion H_2^+ có tồn tại.

Giản đồ năng lượng các MO đối với phân tử H_2 là: σ_s^2 => $\rho = \frac{2-0}{2} = 1$

Đối với phân tử He_2: $\sigma_s^2\sigma_s^{*2}$ => $\rho = \frac{2-2}{2} = 0$ =>phân tử He_2 không tồn tại.

Như vậy, bằng phương pháp MO thì có thể giải thích được sự tồn tại của ion H_2^+ và nhiều phân tử khác.

Từ phương pháp MO-LCAO thì cứ nAO tổ hợp với nhau bằng phương pháp tổ hợp tuyến tính thì thu được n MO, đối với sự tạo thành phân tử A_2 sẽ có: n/2MO liên kết có năng lượng thấp hơn năng lượng của các AO đem tổ hợp và n/2 MO phản liên kết (MO*) có năng lượng cao hơn năng lượng của các AO đem tổ hợp.

3. Cách khảo sát cấu trúc phân tử theo phương pháp MO

** Điều kiện để các AO có khả năng tổ hợp với nhau là:*

- Các AO tham gia tổ hợp với nhau phải có năng lượng xấp xỉ nhau
- Các AO tham gia tổ hợp phải xen phủ nhau rõ rệt cho nên chỉ cần xét sự tổ hợp của các AO hoá trị lớp ngoài cùng
- Các AO tham gia tổ hợp của hai nguyên tử phải có tính đối xứng giống nhau đối với trục liên kết

** Phân loại các MO:*

Dựa vào tính đối xứng của các MO hay tính đối xứng của phần xen phủ giữa các AO hoá trị, phân loại các MO như sau:

- MO_{σ}: được tạo ra khi phần xen phủ của các AO có tính đối xứng trục
  ns(1) + ns(2) $\rightarrow \sigma_s$ và σ_s*
  npz(1) + npz(2) $\rightarrow \sigma_z$ và σ_z*
  npz(1) + ns(2) $\rightarrow \sigma$ và σ*
  ns(1) + npz(2) $\rightarrow \sigma$ và σ*

- MO_{π}: được tạo ra nếu phần xen phủ nói trên có mặt cắt chứa trục nối hai hạt nhân

  npx(1) + npx(2) $\rightarrow \pi_x$ và π_x*
  npy(1) + npy(2) $\rightarrow \pi_y$ và π_y*

**** Vẽ giản đồ năng lượng của các MO:***

- Các AO tổ hợp có năng lượng càng thấp thì mức năng lượng của các MO thu được càng thấp
- Khi hai AO tham gia tổ hợp xen phủ nhau càng mạnh thì sự tách các mức năng lượng càng lớn, nghĩa là sự chênh lệch giữa MO liên kết và MO phản liên kết càng lớn

**** Tính số electron hoá trị của phân tử và xếp các electron đó vào các MO theo quy tắc sau đây:***

- Nguyên lý Pauly: Mỗi MO xếp tối đa 2e
- Nguyên lý vững bền: Các electron được xếp lần lượt vào các MO có năng lượng từ thấp đến cao
- Quy tắc Hund: Nếu có nMO có mức năng lượng bằng nhau thì các electron có khuynh hướng chiếm đều vào các MO sao cho số electron độc thân là lớn nhất

**** Xác định các đặc trưng cơ bản của phân tử***

- Tính bậc liên kết:

$$\rho = \frac{N - N^*}{2}$$

Trong đó: ρ - Bậc của liên kết hay độ bội của liên kết

N - là số electron trên các MO liên kết
N* - là số electron trên các MO phản liên kết

Từ bậc liên kết suy ra độ bền của liên kết và độ dài liên kết. ρ càng lớn thì liên kết càng bền và độ dài liên kết càng ngắn và ngược lại. ρ = 0 thì không tạo liên kết.

- Xác định từ tính của phân tử:

Khi trong phân tử có electron độc thân thì phân tử đó bị từ trường ngoài hút và chất đó được gọi là chất thuận từ. Khi số electron độc thân càng lớn thì tính thuận từ càng mạnh.

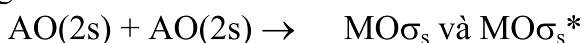
Nếu trong phân tử không có electron độc thân thì chất đó bị từ trường ngoài đẩy và chất đó được gọi là chất nghịch từ.

4. Khảo sát một số phân tử A_2 theo phương pháp MO (A thuộc chu kỳ II)

a. Tìm các MO

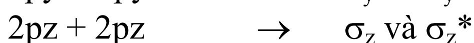
Nguyên tố A có 4AO hoá trị là 2s, 2px, 2py, 2pz, các phân lớp trong sẽ không tham gia tổ hợp

Các AO có tính đối xứng giống nhau sẽ tổ hợp lại với nhau và tạo nên các MO tương ứng như sau:


AO(2s) + AO(2s) → MOσ_s và MOσ_s*


2px + 2px → π_x và π_x*


2py + 2py → π_y và π_y*


2pz + 2pz → σ_z và σ_z*

b. Vẽ giản đồ năng lượng các MO

Ngoài ra, có thể viết dưới dạng dãy thứ tự các mức năng lượng từ thấp đến cao như sau:

(KK) $\sigma_s\ \sigma_s^*\sigma_z\ \pi_x{=}\pi_y\ \pi_x^*{=}\pi_y^*\sigma_z^*$ (dãy 1). Bằng thực nghiệm chứng tỏ rằng dãy 1 chỉ đúng đối với các nguyên tố ở cuối chu kỳ: O_2 F_2 Ne_2

Còn đối với các nguyên tố ở đầu chu kỳ từ Li_2 đến N_2 tuân theo dãy 2:

(KK) $\sigma_s\ \sigma_s^*\ \pi_x{=}\pi_y\ \sigma_z\ \pi_x^*{=}\pi_y^*\sigma_z^*$ (dãy 2). Điều này được giải thích do sự đẩy nhau giữa các mức năng lượng σ_s^* và σ_z, vì đối với các nguyên tố ở đầu chu kỳ mức năng lượng các AO_{2s} và AO_{2p} xấp xỉ nhau.

c. Sắp xếp các electron hoá trị của phân tử vào các MO theo những nguyên lý thích hợp

Phân tử	Số electron hoá trị	Cấu hình electron	ρ
Li_2 (Z=3)	2	(KK) σ_s^2	1
Be_2 (Z=4)	4	(KK) $\sigma_s^2\sigma_s^{*2}$	0
B_2(Z=5)	6	(KK) $\sigma_s^2\sigma_s^{*2}\ \pi_x^1{=}\pi_y^1$	1
C_2(Z=6)	8	(KK) $\sigma_s^2\sigma_s^{*2}\ \pi_x^2{=}\pi_y^2$	2
N_2(Z=7)	10	(KK) $\sigma_s^2\sigma_s^{*2}\ \pi_x^2{=}\pi_y^2\ \sigma_z^2$	3
O_2(Z=8)	12	(KK) $\sigma_s^2\sigma_s^{*2}\ \sigma_z^2\ \pi_x^2{=}\pi_y^2\ \pi_x^{*1}{=}\pi_y^{*1}$	2
F_2(Z=9)	14	(KK) $\sigma_s^2\sigma_s^{*2}\ \sigma_z^2\ \pi_x^2{=}\pi_y^2\ \pi_x^{*2}{=}\pi_y^{*2}$	1

5. Các phân tử không đối xứng AB ($\chi_B > \chi_A$)

**** Nguyên tắc:***

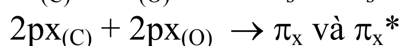
Phân tử được cấu tạo bởi hai nguyên tử khác nhau, ví dụ: CO, NO, CN^-…

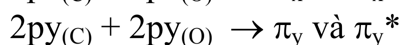
Cũng chọn các AO tham gia tổ hợp tạo thành các MO phân tử theo nguyên tắc trên, nhưng chú ý đến mức năng lượng của các AO. Các AO tham gia tổ hợp phải có mức năng lượng xấp xỉ nhau.

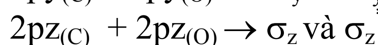
Nếu giữa hai nguyên tử A và B mà độ âm điện của B lớn hơn độ âm điện của A thì mức năng lượng AO của B thấp hơn mức năng lượng AO tương ứng của A nên MO liên kết thu được sẽ nằm gần mức năng lượng AO của B, còn MO phản liên kết thu được sẽ nằm gần mức năng lượng AO của A. Nói chung phân tử AB chu kì 2 có dãy năng lượng các MO tương tự các phân tử A_2 đầu chu kì 2.

Ví dụ 1: Viết cấu hình electron của phân tử CO


$2s_{(C)} + 2s_{(O)} \rightarrow \sigma_s$ và σ_s^*


$2px_{(C)} + 2px_{(O)} \rightarrow \pi_x$ và π_x^*


$2py_{(C)} + 2py_{(O)} \rightarrow \pi_y$ và π_y^*

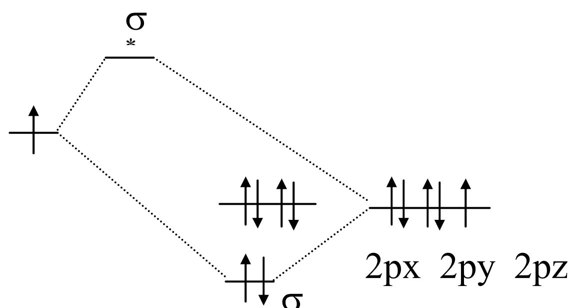

$2pz_{(C)} + 2pz_{(O)} \rightarrow \sigma_z$ và σ_z^*

Tổng electron hoá trị là 10: (KK) $\sigma_s^2\sigma_s^{*2}\ \pi_x^2{=}\pi_y^2\ \sigma_z^2$ $\quad \rho = \frac{8-2}{2} = 3$

Tương tự khảo sát các phân tử CN, CN^-, NO và NO^+

Ví dụ 2: Phân tử HF

Tham gia tổ hợp tạo MO gồm AO(1s) của H và 2pz của F tạo thành MOσ và MOσ* do tính đối xứng giống nhau. Ngoài ra, nguyên tử F còn có 2 obitan hoá trị 2px và 2py không có obitan tương ứng của nguyên tử H để cùng tổ hợp. Các AO này vẫn định chỗ tại nguyên tử F và có mức năng lượng như trong nguyên tử, ở trong phân tử chúng được gọi là các MO không liên kết.



Cấu hình e: HF $\sigma_s^2 nx^2 = ny^2$ $\rho = \frac{2-0}{2} = 1$

Ghi chú:

- Kết quả thu được phù hợp với phương pháp cặp electron liên kết
- Tuy nhiên có ưu điểm hơn so với phương pháp cặp electron liên kết là có thể giải thích được sự tồn tại của liên kết có độ bội là thập phân ví dụ như F_2^+, H_2^+, O_2^+, O_2^- …
- Giải thích được tính thuận từ và nghịch từ của nhiều phân tử

B- Cấu tạo phân tử

I. Độ phân cực của phân tử:

1. **Phân tử có cực và không cực**

Phân tử không phân cực là phân tử có cấu tạo hoàn toàn đối xứng nên trọng tâm của điện tích (+) và trọng tâm của điện tích (-) của phân tử trùng lên nhau

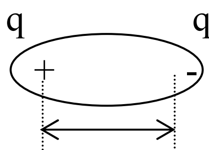
Ví dụ: Phân tử gồm hai nguyên tử giống nhau như H_2, O_2, N_2, hoặc phân tử có cấu tạo đối xứng như CH_4, BF_3, BF_4^-…

Phân tử có cực là phân tử có cấu tạo không đối xứng, do đó trọng tâm của điện tích (+) và trọng tâm điện tích (-) không trùng nhau

Ví dụ: Phân tử HCl, HF, H_2O, NH_3…

2.Mô men lưỡng cực của phân tử (μ)

Mỗi phân tử có cực là một lưỡng cực điện gồm hai điện tích ngược dấu (+q) và (-q) đặt cách nhau một khoảng là l



Để đánh giá độ phân cực của phân tử người ta đưa ra một đại lượng là momen lưỡng cực $\mu = q.l$ (C.m) hay (D : debye), $1D = 3{,}33.10^{-30}$ Cm

Trong đó: q là giá trị tuyệt đối của điện tích , C (Coulomb)
l là độ dài lưỡng cực, m

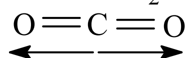
Momen lưỡng cực là một đại lượng có hướng. Người ta quy ước chiều hướng từ trọng tâm của điện tích (+) đến trọng tâm của điện tích (-).

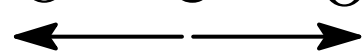
Momen lưỡng cực μ đặc trưng cho độ phân cực của phân tử: μ càng lớn thì phân tử càng phân cực: các phân tử cộng hoá trị có μ trong khoảng từ 0 đến 4D, các phân tử ion có μ trong khoảng từ 4 - 11D.

Mômen lưỡng cực phụ thuộc vào nhiều yếu tố như: sự chênh lệch độ âm điện giữa các nguyên tử tham gia liên kết, tính đối xứng của phân tử, các cặp electron tự do…

Ví dụ:

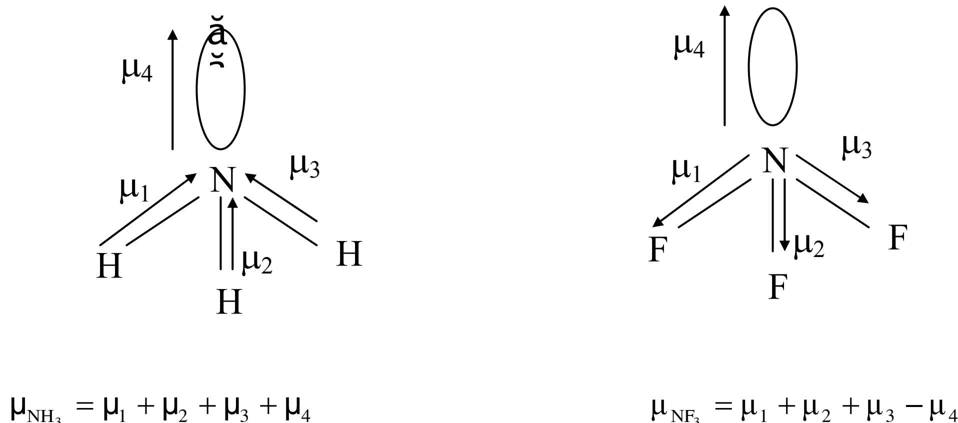
+ Phân tử HCl có μ = 1,04D, phân tử HI có μ = 0,44D
+ Phân tử CO_2 có cấu trúc thẳng:





μ_1 μ_1 có $\mu_{tổng}=0$, các liên kết C=O phân cực mạnh nhưng phân tử CO_2 không phân cực do μ=0.

Ví dụ: Hai phân tử NH_3 và NF_3 đều có cấu tạo là tháp tam giác, đáng lẽ độ phân cực của hai phân tử này phải bằng nhau nhưng thực tế μ_{NH3} = 1,46D và μ_{NF3} = 0,2D, điều này được giải thích như sau:



$\mu_{NH_3} = \mu_1 + \mu_2 + \mu_3 + \mu_4$ $\mu_{NF_3} = \mu_1 + \mu_2 + \mu_3 - \mu_4$

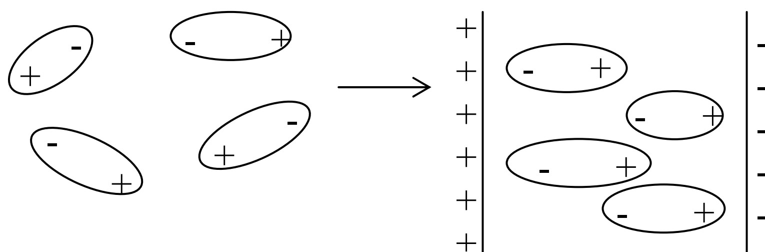
Trong phân tử NH_3 momen lưỡng cực μ của cặp electron tự do cùng chiều với momen lưỡng cực μ của các mối liên kết N-H do đó tổng momen lưỡng cực của phân tử là lớn. Còn trong phân tử NF_3 hướng μ của cặp electron tự do ngược chiều với μ của các mối liên kết N-F do đó tổng μ của phân tử NF_3 nhỏ hơn.

3. Sự phân cực hoá phân tử

Dưới tác dụng của điện trường ngoài các phân tử bị biến dạng và thay đổi cấu trúc, do đó momen lưỡng cực phân tử bị thay đổi. Đó là hiện tượng phân cực hoá phân tử.

* Hiện tượng phân cực hoá phân tử

Dưới tác dụng của điện trường ngoài gây ra bởi hai tụ điện, các phân tử có cực được sắp xếp lại theo phương của điện trường, đó là sự phân cực định hướng



Mặt khác, mỗi momen lưỡng cực cũng bị kéo dài ra làm tăng trị số của momen lưỡng cực phân tử, đó là sự phân cực biến dạng.

Đối với các phân tử không cực: Khi đặt trong điện trường giữa hai bản tụ điện thì các mây electron bị hút về bản (+) của tụ điện, còn hạt nhân bị hút về phía bản (-), kết quả trong phân tử xuất hiện một momen lưỡng cực cảm ứng, đây là hiện tượng phân cực hoá cảm ứng.

Các mối liên kết yếu:

Ngoài các mối liên kết hoá học như liên kết cộng hoá trị, liên kết ion có năng lượng cỡ vài trăm kJ/mol trở lên, còn gặp nhiều loại liên kết yếu hơn có năng lượng cỡ vài chục kJ/mol đó là liên kết hydro và lực Van der Waals. Các liên kết yếu này có vai trò quan trọng trong quá trình chuyển trạng thái như bay hơi, nóng chảy, chuyển dạng thù hình…

1. Liên kết hydro:

Là liên kết phụ, nguyên tử H sau khi liên kết với nguyên tử X có độ âm điện lớn lại có khả năng liên kết phụ với một nguyên tử khác cũng có độ âm điện lớn

* Cơ chế tạo liên kết hydro: nguyên tử H khi liên kết với nguyên tử X có độ âm điện lớn như F, O, N thì cặp electron hoá trị sẽ bị lệch về phía nguyên tử X, nguyên tử H chỉ còn lại hạt nhân tích điện dương, do đó nó có khả năng liên kết với nguyên tử khác cũng có độ âm điện lớn và liên kết này được gọi là liên kết hydro.

Ví dụ: $H^{\delta+} - F^{\delta-} ... H^{\delta+} - F^{\delta-}$

* Năng lượng của liên kết H cỡ 8- 40 $kJ.mol^{-1}$. Năng lượng của liên kết hydro càng lớn khi độ âm điện của nguyên tố liên kết với nó càng lớn và kích thước càng nhỏ

* ảnh hưởng của liên kết hydro:

Năng lượng của liên kết hydro nhỏ so với các liên kết khác nên hầu như nó chỉ ảnh hưởng đến tích chất lý học của các chất như nhiệt độ sôi, nhiệt độ nóng chảy hay khả năng hoà tan giữa các chất.

Ví dụ:

- Do liên kết hydro gây ra hiện tượng liên hợp phân tử: $(HF)_n$: n= 2-4; $(H_2O)_n$: n= 2-3. Do hiện tượng liên hợp phân tử làm cho các chất trở nên khó bay hơi, do đó làm tăng nhiệt độ sôi, nhiệt độ bay hơi. HF có nhiệt độ sôi, nhiệt độ bay hơi cao hơn nhiều so với HCl, HBr, HI. H_2O có nhiệt độ sôi và nhiệt độ bay hơi cao hơn nhiều so với H_2S, H_2Se, H_2Te.

- Do liên kết H làm giảm khả năng điện ly của nhiều chất: HF là axit yếu, chất điện ly yếu trong đó HCl, HBr, HI là axit mạnh

- Gây ra sự bất thường về tỷ khối của nước: thông thường khi nhiệt độ tăng thì tỷ khối của các chất giảm xuống, nhưng đối với nước ở $t < 4^{oC}$ thì tỷ khối của nước tăng theo nhiệt độ và đạt giá trị cực đại ở 4^{oC} và sau đó tỷ khối lại giảm dần theo nhiệt độ.

2. Lực giữa các phân tử:

Thực nghiệm cho thấy, giữa các phân tử của một chất (kể cả các phần tử không phân cực) luôn tồn tại lực tương tác, gọi là lực Van der Waals. Lực Vander Waals giữ vai trò quan trọng trong quá trình chuyển trạng thái tập hợp.

Bản chất của lực Van der Waals gồm có ba loại lực sau:

* Lực định hướng:

Tồn tại trong các phân tử phân cực. Các phân tử phân cực hút lẫn nhau bằng các điện tích ngược dấu của lưỡng cực phân tử, do đó các phân tử này định hướng với nhau theo một hướng xác định. μ càng lớn thì lực định hướng càng lớn.

* Lực cảm ứng:

Xuất hiện giữa các phân tử có cực và không cực. Khi phân tử không cực tiến gần đến phân tử có cực thì dưới tác dụng của điện trường gây ra bởi phân tử phân cực thì các phân tử không cực bị cảm ứng điện và tạo thành lưỡng cực cảm ứng

* Lực khuếch tán:

Do sự chuyển động không ngừng của electron và chuyển động dao động của hạt nhân gây nên sự bất đối xứng tạm thời về sự phân bố trọng tâm điện tích (+) và điện tích (-) tạo nên momen lưỡng cực tạm thời trong phân tử. Lưỡng cực tạm thời luôn xuất hiện, triệt tiêu, đổi dấu.Sự xuất hiện lưỡng cực này và sự mất đi xảy ra một cách nhịp nhàng tạo thành một lực hút thường xuyên gọi là lực khuếch tán.

* Đặc điểm của lực Van der Waals

Không có tính chọn và bão hoà
Năng lượng nhỏ hơn 40 kJ/mol^{-1}
Lực Van der waals càng lớn khi phân tử có momen lưỡng cực lớn, có kích thước và khối lượng lớn.

Tài liệu tham khảo:

1. Nguyễn Đình Chi, Cơ Sở Lí Thuyết Hóa Học, NXB GD, 2004.
2. Nguyễn Hạnh, , Cơ Sở Lí Thuyết Hóa Học, Tập 2, NXB GD 1997.
3. Lê Mậu Quyền, Cơ Sở Lí Thuyết Hóa Học - Phần Bài Tập, NXB KHKT, 2000.